



**Universidade do Estado do Rio de Janeiro**

Centro de Tecnologia e Ciências

Faculdade de Engenharia

Natalie de Alcantara Ramos Baião

**Estudo de lixiviação de nitrato, por modelagem, num cafezal em Santo  
Antônio do Jardim - SP**

Rio de Janeiro

2019

Natalie de Alcantara Ramos Baião

**Estudo de lixiviação de nitrato, por modelagem, num cafezal em Santo Antônio do  
Jardim - SP**



Dissertação apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Área de Concentração: Saneamento Ambiental – Controle da Poluição Urbana e Industrial

Orientador: Prof. Dr. Wenceslau Geraldes Teixeira

Rio de Janeiro

2019

CATALOGAÇÃO NA FONTE  
UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/B

B152 Baião, Natalie de Alcantara Ramos.  
Estudo de lixiviação de nitrato, por modelagem, num cafezal em Santo Antônio do Jardim - SP / Natalie de Alcantara Ramos Baião. – 2019.  
70f.

Orientador: Wenceslau Geraldês Teixeira.  
Dissertação (Mestrado) – Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Faculdade de Engenharia.

1. Engenharia ambiental - Teses. 2. Plantas - Efeito do nitrogênio - Teses. 3. Solos - Poluição - Teses. 4. Fertilizantes nitrogenados - Teses. 5. Solos - Lixiviação - Teses. I. Teixeira, Wenceslau Geraldês. II. Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Faculdade de Engenharia. III. Título.

CDU 332.368

Bibliotecária: Júlia Vieira – CRB7/6022

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta tese, desde que citada a fonte.

---

Assinatura

---

Data

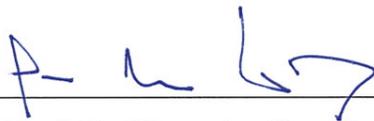
Natalie de Alcântara Ramos Baião

**Estudo de lixiviação de nitrato, por modelagem, num cafezal em Santo Antônio do Jardim - SP**

Dissertação apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Área de Concentração: Saneamento Ambiental – Controle da Poluição Urbana e Industrial.

Aprovada em: 04 de setembro de 2019.

Banca Examinadora:



---

Prof. Dr. Wenceslau Geraldes Teixeira (Orientador)



---

Prof Dr. Elisabeth Ritter – UERJ



---

Prof Dr. Camila Rosa Bezerra Coelho – UFRJ

Rio de Janeiro

2019

Aquele que diz:

“ Não tenha medo, pois estou com você. Não fique ansioso, pois eu sou o seu Deus. Vou fortalecê-lo, sim, vou ajudá-lo. Vou segurá-lo firmemente com a minha mão direita de justiça. Pois eu, Jeová, seu Deus, seguro a sua mão direita; sou aquele que lhe diz: ‘Não tenha medo. Eu o ajudarei.’ ”

Isaías 41:10, 13

## AGRADECIMENTOS

Ao meu marido Diego Baião por me incentivar sempre a ser uma pessoa melhor e fazer coisas novas e importantes, mesmo antes de eu saber que essas coisas eram possíveis ou necessárias;

À minha mãe por me incentivar o amor ao conhecimento desde muito cedo e que ele poderia transformar nossas vidas;

À Julia Nogueira por todas as conversas que me mantiveram no prumo e me engrandeceram como mulher cientista, por sempre ter uma solução científica ou lógica quando tudo parece perdido, por estar sempre por perto;

Aos colegas Ademir Fontana, Andrea Matos e Clayton Hashimoto por estarem sempre dispostos a ajudar nas minhas dúvidas, por me darem ideias e dicas características de pessoas de mente brilhante;

Aos proprietários da Fazenda Santana pela permissão e apoio na realização do experimento e aos pesquisadores responsáveis pelo projeto da Embrapa Ana Paula Contador Packer e Alexandre Ortega Gonçalves e equipe, por disponibilizarem os dados e auxiliar na organização das informações necessárias ao desenvolvimento desse trabalho;

Ao meu orientador Wenceslau Geraldês Teixeira pela orientação e pela evolução profissional que me proporcionou, me ensinando que eu poderia fazer mais e melhor e que muitas vezes precisamos trilhar um caminho para só depois entender o significado dele;

À Universidade do Estado do Rio de Janeiro pelo suporte acadêmico.

À Embrapa Solos pela liberação e apoio no desenvolvimento experimental do trabalho.

## RESUMO

BAIÃO, Natalie de Alcantara Ramos. **Estudo de lixiviação de nitrato, por modelagem, num cafezal em Santo Antônio do Jardim – SP.** 2019. 70f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) – Faculdade de Engenharia, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2019.

O crescimento e desenvolvimento das plantas requer a presença de nutrientes em quantidades adequadas. Os fertilizantes nitrogenados vêm sendo bastante utilizados para o fornecimento de uma nutrição apropriada às plantas. Entretanto, a aplicação em larga escala de fertilizantes nitrogenados causa impactos ambientais por aumentar a probabilidade de contaminação das águas subterrâneas, a emissão de gases de efeito estufa e representa desperdício de recursos financeiros. O objetivo deste trabalho foi avaliar a dinâmica da umidade e a lixiviação de nitrato num cafezal em Latossolo Vermelho Amarelo. Foram obtidos dados de caracterização do solo, práticas de cultivo e dados microclimáticos num cafezal cultivado com café Arábica Catuaí situado em Santo Antônio do Jardim, São Paulo. A partir de amostras de solo foram obtidos dados que descrevem às característica físico-hídricas que afetam a dinâmica de água e de solutos no solo. Os parâmetros de transporte e as condições de contorno foram inseridos no modelo HYDRUS 1D para a parametrização do modelo para predição do fluxo da água e fluxo de nitrato. O desempenho do modelo foi avaliado com base na análise dos resíduos e do erro médio quadrático. A simulação no modo direto não apresentou um bom ajuste para a retenção de água e os desvios se apresentavam enviesados. Com o uso de dados de umidade volumétrica obtidos no campo e uso de rotinas de simulação inversa, se conseguiu uma boa predição da umidade volumétrica da água indicado pelos baixos valores de erro quadrado médio (0,04) e resíduos sem tendências. Foi feita uma simulação da movimentação da pluma de nitrato após a aplicação do fertilizante. Foi estimada uma concentração de nitrato de  $5,1 \text{ mg/cm}^3$  na profundidade de 110 cm no fim de 92 dias. O fluxo total de nitrato lixiviado em 92 dias foi estimado em  $131,8 \text{ mg/cm}^2$  (28% de lixiviação). O software HYDRUS 1D foi eficiente para simulações da umidade volumétrica do solo em Latossolo Vermelho Amarelo e o modelo de equilíbrio para o transporte de solutos no solo foi aparentemente eficiente para estimar o deslocamento de nitrato. O alto potencial de lixiviação apresentado indica que a aplicação de fertilizantes em cafezais neste solo com o clima desta região apresenta riscos ambientais devido à possibilidade de contaminação do lençol freático e riscos de perdas financeiras.

Palavras-chave: Dinâmica de nitrato em solo; Lixiviação; Modelagem computacional; HYDRUS 1D.

## ABSTRACT

BAIÃO, Natalie de Alcantara Ramos. **Modeling study of nitrate leaching in a coffee plantation in Santo Antônio do Jardim - SP**. 2019. 70f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) – Faculdade de Engenharia, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2019.

Crop growth and development requires the presence of nutrients in adequate quantities. Nitrogen fertilizers have been widely applied to provide proper crop nutrition. However, large-scale application of nitrogen fertilizers causes environmental impacts by increasing the probability of groundwater contamination, greenhouse gas emissions and wasting financial resources. The objective of this work was to evaluate the moisture dynamics and nitrate leaching in a Latossolo Vermelho Amarelo coffee plantation. Soil characterization data, cultivation practices and microclimatic data were obtained in a coffee plantation by Arabica Catuaí coffee located in Santo Antônio do Jardim, São Paulo. Were obtained from soil samples data describing the physico-hydraulic characteristics that affect the dynamics of water and solutes in the soil. Transport parameters and boundary conditions were entered in the HYDRUS 1D model for the parameterization in order to predict water and nitrate flow. Model performance was evaluated based on residual analysis and mean square error. The direct simulation did not have a good fit for water retention and the deviations were biased. By the use of field water volumetric content data and the inverse simulation routines, a good prediction of the water volumetric content was indicated by the low mean square error (0.04) and non-trend residues. A simulation of nitrate movement after fertilizer application was made. A nitrate concentration of  $5.1 \text{ mg.cm}^{-3}$  at a depth of 110 cm at the end of 92 days was estimated. The total flow of leached nitrate at 92 days was estimated at  $131.8 \text{ mg.cm}^{-2}$  (28% leaching rate). The HYDRUS 1D software was efficient for simulating soil water volumetric content in Latossolo Vermelho Amarelo and the equilibrium model for soil solute transport was apparently efficient for estimating nitrate displacement. The high potential of leaching indicates that the application of fertilizers in coffee plantations in this soil with the climate of this region presents environmental risks due to the possibility of groundwater contamination and risks of financial losses.

Keywords: Nitrate dynamics in soil; Leaching; Computational modeling; HYDRUS 1D.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Demanda por fertilizantes nitrogenados em cada continente no ano de 2015 (Fonte: FAO, 2015).....	13
Figura 2. Mapa do local de estudo (Fonte: Google Maps).....	26
Figura 3. Curvas de retenção de água ajustadas pelo programa RETC.....	44
Figura 4. Valores medidos e estimados de teor de água no solo nas profundidades de 10 cm (A), de 50 cm (B) e a precipitação efetiva diária calculada (C).....	46
Figura 5. Diagramas de distribuição dos resíduos a (A) 10 cm e (B) 50 cm e diagramas de distribuição de resíduos padronizados a (C) 10 cm e (D) 50 cm.....	47
Figura 6. Valores medidos e valores estimados após validação de teor de água no solo nas profundidades de 10 cm (A), de 50 cm (B) e a precipitação efetiva diária calculada (C).....	50
Figura 7. Diagramas de distribuição dos resíduos a (A) 10 cm e (B) 50 cm e diagramas de distribuição de resíduos padronizados a (C) 10 cm e (D) 50 cm, após validação.....	51
Figura 8: Concentração estimada de nitrato em função da profundidade do solo.....	53
Figura 9: Fluxo cumulativo de nitrato no fundo do perfil (110 cm de profundidade).....	54

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Fertilizantes utilizados, datas das aplicações e total de N aplicado em cada tratamento.....	27
Tabela 2. Metodologias utilizadas para determinação dos parâmetros nas amostras de solo...	28
Tabela 3. Parâmetros da função de Feddes selecionados no banco de dados do software.....	30
Tabela 4. Valores da literatura dos parâmetros da isoterma de Freundlich para o nitrato em Latossolo Vermelho. $*\beta = 1/n$ .....	34
Tabela 5. Resultados da caracterização granulométrica do solo.....	38
Tabela 6. Resultados de caracterização das amostras de solo indeformadas.....	39
Tabela 7. Resultados da caracterização química de amostra de solo de um cafezal em Santo Antônio do Jardim - SP.....	39
Tabela 8. Condutividade hidráulica saturada obtida em um Latossolo Vermelho Amarelo em Santo Antônio do Jardim - SP.....	39
Tabela 9. Dados experimentais para construção da curva de retenção.....	41
Tabela 10. Pontos de retenção de água no solo de cada horizonte de solo coletado.....	42
Tabela 11. Parâmetros de van Genuchten (unimodal) da curva de retenção de água no solo...	43
Tabela 12. Curva de retenção de água de horizontes de solos de um Latossolo Vermelho Amarelo de Santo Antônio do Jardim – SP.....	44
Tabela 13. Valores de Ks ajustados numericamente.....	52
Tabela 14. Valores dos parâmetros da curva de retenção de água ajustados numericamente...	52
Tabela 15. Dados de lixiviação encontrados na literatura.....	55
Tabela 16: Dados diários de precipitação e evapotranspiração usados como condição de contorno de topo.....	67
Tabela 17. Dados medidos no campo de teor de água no solo.....	69
Tabela 18. Concentração de nitrato na solução do solo.....	70

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

N	Nitrogênio
FAO	Organização das Nações Unidas para Alimentação e Agricultura
NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	Íon nitrato
$\theta_r$	Umidade volumétrica residual
$\alpha$	Parâmetro adimensional da curva de retenção de água no solo
n	Parâmetro adimensional da curva de retenção de água no solo
m	Parâmetro adimensional da curva de retenção de água no solo
$\alpha_2$	Parâmetro adimensional da curva de retenção de água no solo
n <sub>2</sub>	Parâmetro adimensional da curva de retenção de água no solo
w <sub>2</sub>	Parâmetro adimensional da curva de retenção de água no solo
$\theta_s$	Umidade volumétrica saturada
$\psi$	Potencial mátrico ou pressão de sucção da água no solo
K <sub>s</sub>	Condutividade hidráulica saturada
l	Tortuosidade foram fixados
K <sub>d</sub>	Coefficiente de distribuição ou coeficiente de partição sólido-líquido
$\lambda$	Dispersividade
D <sub>w</sub>	Coefficiente de difusão molecular em fase líquida (difusividade)
$\eta$	Constante empírica dos modelos de sorção
$\beta$	Constante empírica dos modelos de sorção
P <sub>E</sub>	Precipitação efetiva
P <sub>T</sub>	Precipitação total
P <sub>i</sub>	Fração de chuva interceptada
ET <sub>o</sub>	Evapotranspiração de referência
ET <sub>c</sub>	Evapotranspiração da cultura
K <sub>c</sub>	Coefficiente de cultura
pH	Potencial de hidrogênio
P	Fósforo
$\Psi_g$	Energia potencial gravitacional
$\Psi_p$	Energia potencial de pressão
$\Psi_m$	Energia potencial matricial

## SUMÁRIO

1. OBJETIVOS.....	14
<b>1.1 Objetivo geral.....</b>	<b>14</b>
<b>1.2 Objetivos específicos.....</b>	<b>15</b>
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	15
<b>2.1 Fertilizantes.....</b>	<b>15</b>
<b>2.2 Os Latossolos.....</b>	<b>16</b>
<b>2.3 Dinâmica da água no solo.....</b>	<b>16</b>
<b>2.4 Dinâmica de solutos no solo.....</b>	<b>17</b>
<b>2.5 Relevância do estudo de movimentação de nitrato no solo.....</b>	<b>18</b>
<b>2.6 Condições atmosféricas variáveis no tempo.....</b>	<b>21</b>
<b>2.7 Uso de modelagem no HYDRUS 1D como estratégia preditiva.....</b>	<b>22</b>
3. METODOLOGIA.....	25
<b>3.1 Caracterização da área de estudo.....</b>	<b>25</b>
<b>3.2 Caracterização do solo.....</b>	<b>27</b>
<b>3.3 Avaliação da condutividade hidráulica saturada do solo.....</b>	<b>28</b>
<b>3.4 Retenção de água no solo.....</b>	<b>29</b>
<b>3.5 Função de captação de água pelas raízes.....</b>	<b>30</b>
<b>3.6 Dados de entrada do HYDRUS 1D.....</b>	<b>31</b>
3.6.1 Parâmetros de transporte de solutos.....	32
3.6.1.1 Obtendo o valor de $\lambda$ .....	32
3.6.1.2 Obtendo o valor de $D_w$ .....	32
3.6.1.3 Obtendo os valores de $\eta$ , $\beta$ e $K_d$ .....	33
3.6.1 Condições iniciais.....	34
3.6.1.1 Condições iniciais de umidade do solo.....	34
3.6.1.2 Condições iniciais de concentração de soluto.....	34
3.6.2 Condição de contorno do soluto.....	35
3.6.3 Condição de contorno variável no tempo.....	35
3.6.3.1 Precipitação e precipitação efetiva.....	36
3.6.3.2 Evapotranspiração.....	36
<b>3.7 Modelagem inversa para validação dos dados.....</b>	<b>37</b>
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	38
<b>4.1 Caracterização do solo.....</b>	<b>38</b>
<b>4.2 Condutividade hidráulica saturada do solo.....</b>	<b>39</b>
<b>4.3 curvas de retenção de água no solo.....</b>	<b>40</b>
<b>4.4 Dinâmica de água no perfil de solo.....</b>	<b>44</b>
4.4.1 Dados estimados por simulação computacional no HYDRUS 1D.....	44
4.4.2 Validação e ajuste da simulação computacional por modelagem inversa.....	48
4.4.2.1 Ajuste numérico dos parâmetros hidráulicos durante o processo de validação.....	51
<b>4.5 Estimativa da concentração de <math>\text{NO}_3^-</math> na solução do solo.....</b>	<b>53</b>
CONCLUSÃO.....	58
REFERÊNCIAS.....	59
APÊNDICE A – CONDIÇÕES DE CONTORNO ATMOSFÉRICAS VARIÁVEIS NO TEMPO.....	65
APÊNDICE B – DADOS DE CAMPO DE TEOR DE ÁGUA NO SOLO.....	68
APÊNDICE C – DADOS EXPERIMENTAIS DE CONCENTRAÇÃO DE $\text{NO}_3^-$ NA SOLUÇÃO DO SOLO.....	70

## INTRODUÇÃO

O nitrogênio (N) é um dos principais macronutrientes para as plantas, sendo sua disponibilidade limitante para o crescimento da planta. Este elemento desempenha um papel importante na constituição de elementos vitais para a planta, tais como proteínas, vitaminas, clorofila e ácidos nucleicos (MARSCHNER, 1986). Este nutriente está presente naturalmente no solo em diversas formas orgânicas e minerais decorrentes do ciclo do nitrogênio. O ciclo biogeoquímico do nitrogênio é gasoso e envolve diversos processos que adicionam/removem N dos ecossistemas ou convertem N de uma forma química em outra, tais como: amonificação, nitrificação, desnitrificação e fixação de nitrogênio gasoso atmosférico. Outros processos ainda contribuem para a disponibilização deste nutriente, como: deposição seca e úmida de N, lixiviação de N e erosão de escoamento superficial, Apesar de o nitrogênio estar presente de forma abundante no ar atmosférico, grande parte dos organismos vivos não podem obter ele como nutriente diretamente nessa forma. Com exceção das plantas fixadoras de N e plantas insetívoras, o N encontrado no tecido vegetal é absorvido pelas raízes, principalmente em uma forma inorgânica como nitrato ( $\text{NO}_3^-$ ) ou amônio. Logo, o nitrogênio orgânico deve ser convertido para a forma do íon  $\text{NO}_3^-$  (FORDE; CLARKSON, 1999). Esta conversão é feita através do processo de mineralização ou de nitrificação. A mineralização é um processo que envolve a conversão do N orgânico em N inorgânico e pode se dar através da ação de bactérias especializadas ou, em menor escala, por descargas elétricas na atmosfera. Já a cadeia de nitrificação envolve a produção de nitrito, nitrato e amônio também com participação de diferentes bactérias em cada etapa. (BOTTOMLEY et al., 1994; BRAGA et al., 2005)

Anteriormente, os fertilizantes nitrogenados disponíveis eram produzidos com resíduos de vegetais decompostos e estrume de animais. Sendo estes produtos naturais, sua biodegradação e incorporação à cadeia alimentar era facilitada e não causava desequilíbrio e danos ao meio ambiente. Após a revolução industrial, o mundo presenciou um acentuado crescimento da população que implicou em uma crescente demanda na produção de alimentos (BRAGA et al., 2005). Para fazer frente a essa demanda, foi necessário um aumento na produtividade agrícola. Dados recentes demonstraram que o somatório do consumo mundial de fertilizantes dos três principais nutrientes - nitrogênio (N), fósforo ( $\text{P}_2\text{O}_5$ ) e potássio ( $\text{K}_2\text{O}$ ) - alcançou cerca de 186,67 milhões de toneladas em 2016. Este consumo representa um aumento de 1,4% em relação aos níveis de consumo de 2015, e a Organização das Nações Unidas para Alimentação e Agricultura (FAO) ainda prevê o crescimento anual médio de 2,4% até o ano de 2020 (FAO, 2015).

As taxas de aplicação de fertilizantes variam muito, dependendo das necessidades da cultura. Os fertilizantes nitrogenados possuem relativamente baixo custo e permitem uma flexibilidade de aplicação, principalmente se for levado em conta o seu impacto no rendimento da cultura. Isso acaba levando a um uso excessivo por parte dos agricultores (GOULDING; JARVIS; WHITMORE, 2008). Existe também uma variação geopolítica no consumo de fertilizantes nitrogenados. Por exemplo, as Américas e a Europa representam juntas cerca de 35% da demanda mundial por fertilizantes nitrogenados (FAO, 2015). Já no caso do continente Asiático, o crescimento do consumo de fertilizantes está intimamente atrelado ao estado do desenvolvimento econômico, representando hoje cerca de 60% da demanda mundial de fertilizantes nitrogenados. Como a região apresenta renda per capita baixa e taxa de crescimento populacional muito elevada, o crescimento econômico causou um aumento rápido da demanda por cereais, pressionando o setor produtivo agrícola. Tendo o continente área cultivável limitada, a maioria das nações asiáticas atendeu a crescente demanda por cereais aumentando o rendimento das culturas através de um uso mais intensivo de fertilizantes químicos (HOSSAIN; SINGH, 2000). A Figura 1 apresenta de forma gráfica, a contribuição de cada região na demanda mundial por fertilizantes nitrogenados.

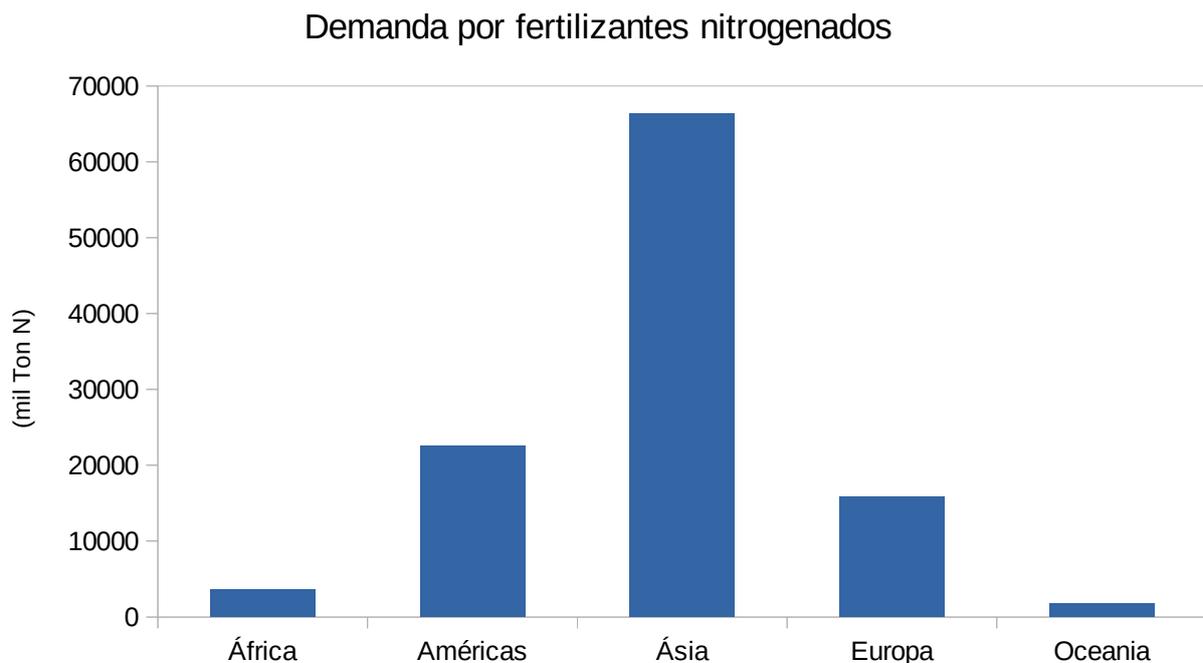


Figura 1. Demanda por fertilizantes nitrogenados em cada continente no ano de 2015 (Fonte: FAO, 2015)

Quando se trata de cultura cafeeira a fertilização nitrogenada ganha destaque. A escassez de N é considerada limitante para o crescimento do café e conseqüentemente para atingir sua

produtividade ótima e, devido a isso, esse aporte de nutrientes passa a representar uma porcentagem considerável do custo total de produção(VAAST; ZASOSKI; BLEDSOE, 1998). Fenilli (2006) apresenta um balanço de N derivado de fertilizante após 1 ano de cultura de café. O estudo demonstra a seguinte distribuição nos compartimentos da planta de N derivado de fertilizante: 19,51% na parte aérea da planta, 14,20% nas raízes e 28,35% nas folhas caídas ao chão; demonstrando uma eficiência total de absorção do adubo pela planta de cerca de 62%.

A aplicação de fertilizantes de maneira indiscriminada deixa N residual no solo, que dependendo das condições climáticas nos períodos subsequentes, pode ser lixiviado para as camadas inferiores do solo e se tornar um potencial contaminante para as águas subterrâneas (JIAO et al., 2017; REICHARDT; LIBARDI; URQUIAGA, 1982). A aplicação em larga escala de fertilizantes nitrogenados causa impactos ambientais por aumentar a probabilidade de contaminação das águas subterrâneas e de emissão de gases de efeito estufa, podendo representar uma ameaça ao meio ambiente, à saúde humana e a biodiversidade. Representa também desperdício de recursos financeiros (BRAGA et al., 2005; GOULDING; JARVIS; WHITMORE, 2008). Estudar as perdas por lixiviação do nitrato pode contribuir para um manejo mais sustentável da fertilidade do solo e para a garantia de produção de alimentos, bem como auxilia na mitigação dos impactos ambientais das atividades agrícolas.

## 1. OBJETIVOS

### 1.1 Objetivo geral

Estimar a lixiviação de  $\text{NO}_3^-$  em Latossolo Vermelho Amarelo sob um cafezal em Santo Antonio do Jardim – SP.

## 1.2 Objetivos específicos

- Caracterizar as propriedades físico-hídricas do solo;
- Determinar a precipitação efetiva e a evapotranspiração do cafezal no período de estudo;
- Validar as predições da umidade volumétrica a 10 e 50 cm de profundidade com dados medidos no campo;
- Parametrizar o programa HIDRUS 1D para predição do fluxo da água e fluxo de nitrato;
- Avaliar a dinâmica da água e a lixiviação de nitrato na área de estudo.

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 Fertilizantes

Os fertilizantes minerais são definidos pela legislação brasileira como: “produto de natureza fundamentalmente mineral, natural ou sintético, obtido por processo físico, químico ou físico-químico, fornecedor de um ou mais nutrientes de plantas” (BRASIL. Decreto nº 4.954, de 14 de janeiro de 2004). Os principais fertilizantes nitrogenados aplicados no Brasil são o nitrato e sulfato de amônio, fosfato monoamônio ou diamônio e a ureia em forma granular. A maioria dos fertilizantes comerciais são mistura de fontes de nitrogênio (N), fósforo (P) e potássio (K), sendo a ureia o fertilizante nitrogenado de maior volume entre as fontes nitrogenadas (ANDA, 2016). Por definição, apenas pode-se fornecer nutrição balanceada quando conhecidas as necessidades específicas da cultura ou área de cultivo. As doses de nitrogênio são determinadas com base na produção esperada, nos teores foliares do nutriente, e com base em teores de matéria orgânica do solo, sendo recomendadas aplicações parceladas durante o ano agrícola (VAN RAIJ et al., 1997). Outros fatores que podem influenciar na escolha da dose aplicada são custo, recomendação do fabricante ou características sazonais. Logo, determinar qual dose será aplicada para o melhor desempenho da safra envolve ajustar um sistema complexo com alguns fatores manipuláveis e outros fatores inerentes. A abordagem mais indicada seria então um manejo de nutrientes específico e local, onde se busca ferramentas e informações para definir as práticas necessárias a um gerenciamento equilibrado de nutrientes (FIXEN et al., 2005). O resultado de um bom manejo de fertilizantes é o uso mais eficiente dos recursos naturais como solo e água, e dos meios de produção agrícolas. Pesquisas específicas podem então fornecer as informações necessárias sobre a fonte do nutriente, taxa, tempo e local de aplicação visando o maior benefício ambiental, social e econômico.

## 2.2 Os Latossolos

Os solos são constituídos por um conjunto de partículas provenientes da decomposição das rochas, com água e ar preenchendo os espaços intermediários. No solo geralmente existem partículas de tamanhos diversos. Apesar de em alguns casos ocorrer uma pequena cimentação, de maneira geral as partículas encontram-se livres para se deslocar entre si (SOUZA PINTO, 2000).

Latossolos são solos com características fortemente relacionadas a intemperização e lixiviação que ocorreram de forma intensa na rocha de origem e compreendem solos constituídos por material mineral, com horizonte B latossólico imediatamente abaixo de qualquer horizonte diagnóstico superficial, exceto hístico. Esta classe se caracteriza por apresentar solos profundos, de coloração relativamente homogênea com matizes avermelhadas/amareladas e baixo conteúdo de silte em relação à argila (KER, 1997; SANTOS et al., 2013).

## 2.3 Dinâmica da água no solo

O movimento da água no solo sofre influências do sistema poroso, da granulometria e do conteúdo de matéria orgânica (REICHARDT; TIMM, 2004). Dependendo da proporção e composição destas frações, o solo tenderá a reter mais ou menos água em sua matriz. Nos solos saturados, todos os vazios existentes no interior dos poros estão preenchidos com água, enquanto que nos solos não saturados ou insaturados os espaços entre os poros estão parcialmente preenchidos por água e por gases.

A movimentação da água através da matriz do solo envolve o balanço das energias cinética e potencial. A energia cinética pode ser considerada desprezível em vista da velocidade de movimentação da água nos poros ser geralmente muito baixa. A energia potencial, um tipo de energia latente, tem a maior importância na determinação do estado e do movimento de água no solo. A água se move do ponto de maior energia potencial para o ponto de menor energia potencial até que uma condição de equilíbrio seja alcançada. Logo, se faz necessária a determinação da energia potencial total da água para ser possível prever o deslocamento e a direção do movimento da água no solo (ELZEFTAWY; CARTWRIGHT, 1983).

Para a avaliação da energia potencial da água no solo os componentes mais importantes são o gravitacional ( $\Psi_g$ ), de pressão ( $\Psi_p$ ) e o matricial ( $\Psi_m$ ). O potencial gravitacional é influenciado pelo campo gravitacional terrestre; o potencial de pressão leva em consideração as pressões maiores que a pressão atmosférica que atuam sobre a água e o potencial matricial ou mátrico representa as

forças de adsorção responsáveis pela retenção da água na superfície das partículas, e as forças capilares responsáveis pela retenção da água nos poros (REICHARDT; TIMM, 2004).

A curva de retenção de água no solo é a função que descreve a relação entre a umidade volumétrica de água contida no solo ( $\theta$ ) e o potencial ( $h$ ) a que está submetida. Esta curva reflete a energia necessária para se movimentar um determinado volume de água presente no solo. Existem vários métodos para determinação dos pares de potencial / conteúdo volumétrico de água no solo, sendo o da câmara de Richards o mais tradicional. A aplicação de uma força de pressão em um solo saturado irá extrair a água presente reduzindo gradativamente o volume de água nos poros ou reduzindo a espessura da película de água que recobre os grãos em cada poro (GRIGOLON, 2013; MELO FILHO; SACRAMENTO; CONCEIÇÃO, 2015).

Através da equação de Darcy (1856), pode-se estimar o fluxo no solo saturado. Esta equação demonstra que a intensidade de fluxo de água é proporcional ao gradiente de potencial hidráulico (soma dos componentes gravitacional, de pressão e matricial). A equação de Darcy foi desenvolvida para determinar o movimento unidimensional e permanente da água em meios homogêneos e saturados. Mais tarde, Buckingham (1907) tratou de definir uma equação que buscasse quantificar o fluxo de água em meios não saturados (MIQUELETTO, 2007).

## **2.4 Dinâmica de solutos no solo**

Os solutos são parte integrante da solução do solo e são formados por substâncias iônicas e orgânicas, sendo os íons os elementos químicos de maior importância (REICHARDT; TIMM, 2004). O movimento de solutos no solo é governado por diversos fenômenos físicos, químicos e biológicos. Podem ser destacados os fenômenos de advecção e difusão.

Na difusão os íons se movimentam devido ao gradiente de concentração, do ponto de maior concentração para o ponto de menor concentração. Neste tipo de fenômeno, a velocidade de movimentação do soluto é proporcional ao gradiente de concentração (SCOTT, 2000). A difusão é um importante mecanismo para transporte de solutos no solo em direções onde o fluxo de água é pequeno ou inexistente. Quando se trata de um meio poroso não homogêneo como o solo, a movimentação do soluto precisa ser corrigida pelo fator de tortuosidade (TH. VAN GENUCHTEN; LEIJ, 2002).

A advecção é o fenômeno de transferência de massa em que o soluto se desloca devido ao fluxo de solução, que gera um gradiente de velocidade no fluido e promove a dispersão hidrodinâmica. O gradiente de velocidade nos poros é gerado pelos efeitos de atrito nas paredes dos poros, pela variação no tamanho dos poros e pela variação na direção da água (SCOTT, 2000).

A equação de advecção difusão descreve o fenômeno de transferência de massa dentro de um sistema devido a estes dois processos. Considerando que não há fontes ou fugas e que o coeficiente de difusão e a velocidade são constantes, a equação tem a forma abaixo (equação 1) em que o primeiro termo do lado direito da equação representa o processo de difusão, enquanto o segundo descreve convecção ou advecção.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c - \vec{v} \cdot \nabla c. \quad (1)$$

Em que:  $c$  = variável de interesse;  
 $t$  = tempo  
 $D$  = coeficiente de difusão;  
 $v$  = velocidade.

Outro processo relevante que promove o atraso da movimentação de soluto em relação à frente de solvente é o fenômeno de sorção. Este fenômeno propicia que substâncias dissolvidas na fase líquida possam interagir com vários constituintes do solo, tais como minerais primários, óxidos e coloides orgânicos e inorgânicos. Este mecanismo sorção-dessorção em equilíbrio desempenha um papel importante na regulação da disponibilidade de nutrientes para as plantas, na lixiviação e na decomposição de solutos (TH. VAN GENUCHTEN; LEIJ, 2002; WARRICK, 2001).

## 2.5 Relevância do estudo de movimentação de nitrato no solo

Em solos sem restrição de oxigênio, a espécie predominante de N na fase líquida é o nitrato, sendo essa também a forma mais disponível para as plantas devido à sua alta solubilidade (FENILLI, 2006; GHIRBERTO; LIBARDI; TRIVELIN, 2015). O conteúdo de nitrato na solução do solo pode variar muito de forma espacial e temporal devido à ocorrência de muitos processos de produção e consumo que ocorrem simultaneamente no sistema solo/planta (GOULDING; JARVIS; WHITMORE, 2008).

As camadas superiores do solo apresentam predominantemente cargas negativas. Sendo o nitrato um íon também negativo, ele fica pouco adsorvido no complexo trocável do solo. Apesar de ocorrer em pequena escala, o mecanismo de sorção de  $\text{NO}_3^-$  na fase sólida pode ser explicado pela atração sofrida entre cargas opostas regida pela lei de Coulomb. O  $\text{NO}_3^-$  interage com os sítios carregados positivamente dos materiais caulíníticos e dos grupos hidroxílicos protonados nos óxidos de alumínio e de ferro (CAHN; BOULDIN; CRAVO, 1992). Esta baixa interação

eletrostática com a fase sólida e alta solubilidade na fase líquida do solo, faz com que o  $\text{NO}_3^-$  seja considerado uma espécie com grande mobilidade no solo e favorece sua lixiviação para profundidades inexploradas pelas raízes. Em geral a concentração de  $\text{NO}_3^-$  vai ser o indicador de lixiviação de N proveniente de fertilizante (REICHARDT; LIBARDI; URQUIAGA, 1982; ZHANG et al., 2017). Sugere-se que a mobilidade do  $\text{NO}_3^-$  no solo é de 50 a 500 vezes maior que a do amônio (FORDE; CLARKSON, 1999).

Muito se tem estudado sobre a mobilidade de espécies nitrogenadas na solução do solo decorrente da aplicação de fertilizantes. Quando se aplica o fertilizante nitrogenado, uma fração é absorvida pelo sistema radicular, e outra fração pode ser perdida por emissões atmosféricas ou por lixiviação para camadas inferiores fora da área de atuação das raízes (FENILLI, 2006). Porém a mobilidade das espécies de íons nitrogenados em solos tropicais ainda não é bem conhecida. Se faz necessário mais estudos para estabelecer como as propriedades inerentes dos solos tropicais afetam os fenômenos que regem o movimento do  $\text{NO}_3^-$  e sua distribuição espacial (ARMOUR et al., 2014; CAHN; BOULDIN; CRAVO, 1992). Muitos dos estudos disponíveis se concentram apenas nos fatores químicos que afetam o suprimento de nutrientes para a planta, buscando desenvolver métodos que aumentem sua disponibilidade. Existem poucos estudos relacionando a estrutura física do solo e a eficiência de absorção dos nutrientes, apesar de se ter o entendimento de que a estrutura do solo afeta o suprimento de nutrientes e a capacidade deles serem lixiviados para baixo da zona de influência das raízes, principalmente os altamente solúveis como o nitrato (GOULDING; JARVIS; WHITMORE, 2008).

Vários estudos têm sido feitos visando determinar o destino do nitrogênio proveniente de fertilização. Alguns estudos utilizam a marcação de uma fração do fertilizante com isótopos de nitrogênio  $\text{N}^{15}$  para acompanhar a migração da espécie no solo e nos diversos compartimentos da planta (BRUNETTO et al., 2006; FENILLI, 2006). Uma forma usual de quantificar a lixiviação de N é por coleta de amostras de solo em diferentes profundidades e realizar a quantificação de  $\text{NO}_3^-$  após extração em KCl (SHAHROKHANIA; SEPASKHAH, 2018). Outros estudos monitoram os teores de nitrogênio mineral total na solução do solo, com amostragens em diferentes profundidades abaixo da zona radicular e nas áreas de livre drenagem. Nestes estudos a acumulação significativamente maior de N mineral nas parcelas fertilizadas é comparada com as não fertilizadas, indicando a fração de N no subsolo que derivou do fertilizante (FERNANDES; LIBARDI, 2007; SCHROTH et al., 1999). Por serem economicamente mais viáveis e mais simples de serem executados, os estudos que monitoram os teores de N na solução do solo sem marcação isotópica têm se destacado.

Estudos conduzidos em solos tropicais mostram que a lixiviação de  $\text{NO}_3^-$  é mais intensa nas camadas superficiais e que a adsorção desta espécie na fase sólida aumenta com a profundidade (CAHN; BOULDIN; CRAVO, 1992; HARTEMINK et al., 1996). Quando se quantificou N após fertilização, os teores de  $\text{NO}_3^-$  em camadas de solo mais profundas (abaixo de 50 cm) foram superiores aos medidos nas camadas superficiais (JIA et al., 2014). Estudo conduzido em um latossolo amarelo mostra que, considerando uma adubação de  $50 \text{ kg ha}^{-1}$  de  $\text{N-NO}_3^-$ , apenas 11% do  $\text{NO}_3^-$  total estará adsorvido no horizonte superficial do solo (89% do  $\text{NO}_3^-$  na solução do solo) em contraste com 71% que estará adsorvido na camada de 90-120 cm (29% do  $\text{NO}_3^-$  na solução do solo). Estes dados mostram a vulnerabilidade do  $\text{NO}_3^-$  nas camadas superficiais, onde existe influência das raízes e seria desejável maior adsorção deste íon. Nas camadas superficiais do solo o  $\text{NO}_3^-$  está mais deslocado para a fase líquida (solução do solo) e provavelmente será lixiviado mais rapidamente em comparação com as camadas mais profundas. Esse comportamento faz com que a proporção de  $\text{NO}_3^-$  que está no subsolo aumente com a precipitação cumulativa (CAHN; BOULDIN; CRAVO, 1992). Mesmo sendo pouco expressiva, a sorção de  $\text{NO}_3^-$  em superfícies carregadas positivamente tende a retê-lo abaixo da zona de influência das raízes. Se não existe penetração profunda das raízes, este  $\text{NO}_3^-$  adsorvido no subsolo será inevitavelmente lixiviado para profundidades mais baixas (HARTEMINK et al., 1996).

A grande taxa de lixiviação pode ser verificada pela baixa eficiência de absorção de N proveniente de fertilizante. Diversos experimentos estimam que a taxa de recuperação média fique entre 30 e 51% para cereais e entre 25% e 50% para culturas perenes como citrus (CHIEN; PROCHNOW; CANTARELLA, 2009).

Estudos variando a taxa de fertilização têm se mostrado um bom recurso para avaliar a ocorrência de lixiviação. Quando a resposta de rendimento da lavoura não corresponde ao aumento de fertilizante aplicado, isso pode indicar que o N foi lixiviado além da área de influência das raízes sem ser absorvido (REICHARDT; LIBARDI; URQUIAGA, 1982; SCHROTH et al., 1999). Falando em termos de rendimento, estima-se que a taxa de recuperação dos fertilizantes nitrogenados seja extremamente baixa, menor que 10% (JIA et al., 2014). Em um estudo realizado em latossolo da região amazônica que compara parcelas fertilizadas e controle sem fertilização, a diferença de quantidade de N entre a parcela em que foi aplicado fertilizante e a parcela isenta de fertilização foi menor que o esperado. Isso indica que o N que se esperava encontrar em maior quantidade na parcela fertilizada sofreu grande taxa de lixiviação, tendendo a se aproximar do controle (SCHROTH et al., 1999).

Compreender a lixiviação de nitrato é importante para um manejo mais sustentável dos solos tropicais. Cada vez mais se faz necessário uma gestão da agricultura que vise atingir metas de

produção e ao mesmo tempo reflita preocupação com as questões ambientais, com o objetivo de alcançar sistemas agrícolas mais sustentáveis (GOULDING; JARVIS; WHITMORE, 2008).

## 2.6 Condições atmosféricas variáveis no tempo

Para o estudo da dinâmica de água no solo é necessário conhecer as informações relacionadas às condições do meio circundante, a dinâmica climática. Estas informações são medidas no campo em estações microclimáticas ou obtidas de bancos de dados de estações de medida públicas. Estas informações obtidas para cada unidade de tempo estudadas vão compor as condições de contorno variáveis no tempo inseridas no modelo matemático preditivo. Serão necessárias informações que envolvem a interface do sistema solo-planta que estão expostas às condições atmosféricas, visto que o fluxo potencial de água através desta interface é controlado exclusivamente por condições externas. Tais condições externas são controladas por variáveis como a precipitação e a evapotranspiração em função do tempo, e informações de drenagem na superfície e no final da profundidade de interesse do perfil de solo.

Para avaliação da precipitação considera-se a precipitação efetiva, que é a fração de chuva que efetivamente atinge o solo, visto que parte da água é interceptada pela vegetação (RODRIGUES; PRUSKI; SILVA, 2003) Uma das formas de se estimar a precipitação efetiva é descontando da precipitação total a porcentagem de água comumente interceptada pela vegetação que recobre a área estudada (MIRANDA; PEREIRA; MONAT, 2004) .

A evapotranspiração calculada a partir dos dados micrometeorológicos é a evapotranspiração de referência ( $ET_0$ ) obtida pela equação de Penman-Monteith. A  $ET_0$  é um valor de referência, que representa a quantidade de água evapotranspirada por unidade de tempo e de área, por uma cultura verde de baixo porte, cobrindo totalmente o solo sem restrições de água, de altura uniforme e sem deficiência de água. Para regiões tropicais e subtropicais a cultura considerada é a grama batatais (*Paspalum notatum L.*) (ALLEN et al., 1998). Porém, como a equação de Penman-Monteith é baseada em uma situação padrão, pode gerar imprecisões grandes se os valores forem usados diretamente (PAW U; GAO, 1988). Partindo dos valores da  $ET_0$ , é possível estimar a evapotranspiração da cultura ( $ET_c$ ). A  $ET_c$  é a evapotranspiração de culturas bem fertilizadas, livres de doenças, cultivadas em grandes campos, sob condições ótimas de água do solo e atingindo a plena produção sob as condições climáticas dadas. Este coeficiente tem sido usado extensivamente para estimar a necessidade real de água de uma cultura por meio de estimativas ou medições de  $ET_c$  (PEREIRA et al., 2005). Para se estimar este valor é utilizado o coeficiente da cultura ( $K_c$ ), que incorpora as características das culturas e os efeitos médios da evaporação do solo e é um indicador

de significado físico e biológico, uma vez que depende da área foliar, da arquitetura da parte aérea e sistema radicular, da cobertura vegetal e da transpiração da planta (ALLEN et al., 1998).

### **2.7 Uso de modelagem no HYDRUS 1D como estratégia preditiva**

Existe uma grande complexidade temporal e espacial no processo de lixiviação de N, de modo que medidas de campo obtidas em curto prazo não mostram claramente a correlação do uso de fertilizantes com a concentração de nitrato de solução do solo (BLICHER-MATHIESEN; ANDERSEN; LARSEN, 2014). São mais recomendados estudos de longo prazo para desenvolver diretrizes de gerenciamento específicas, porém estes estudos acabam se tornando muito dispendiosos. O custo e o tempo envolvidos na condução de estudos de campo que quantifiquem a lixiviação de nitrato faz do uso de modelos de simulação uma abordagem mais plausível (DASH et al., 2016). Nesse cenário, a modelagem se torna uma boa estratégia para predição da concentração de N na solução do solo, fornecendo uma boa alternativa para uma melhor compreensão da dinâmica de água e solutos (FESSEHAZION et al., 2015).

Em anos recentes, o emprego de modelos matemáticos e simulações computacionais tornaram possível trabalhar os dados experimentais a ponto de obter informações sobre o movimento dos íons nitrogenados na solução do solo e fazer predições a longo prazo. Os modelos tem se mostrado úteis para simular condições economicamente ou tecnicamente inviáveis de serem realizadas em experimentos de campo (SHAHROKHANIA; SEPASKHAH, 2018; ŠIMŮNEK; VAN GENUCHTEN; ŠEJNA, 2016; TAFTEH; SEPASKHAH, 2012). A modelagem matemática tem se mostrado eficiente no estudo de problemas como o manejo da produção de culturas, avaliação do impacto ambiental, etc. Modelos de fluxo no solo e de desempenho de culturas têm sido amplamente utilizados para ampliar e estender as conclusões de resultados experimentais, visto que os resultados de experimentos de campo são frequentemente relevantes apenas para uma condição climática, prática de manejo e tipo de solo específicos (LIANG et al., 2018; SHAHROKHANIA; SEPASKHAH, 2018).

O programa HYDRUS 1D tem se destacado para avaliação os impactos da irrigação e da aplicação de fertilizantes por oferecer uma estimativa segura do transporte de sais e nutrientes nos perfis do solo e também tem se mostrado uma ferramenta eficaz no gerenciamento da água de irrigação. Este programa é largamente utilizado para análise de fluxo de água e transporte de soluto em meios porosos, assumindo o fluxo de água na zona saturada como sendo verticalmente unidimensional (DASH et al., 2016; KANZARI et al., 2018; LYU et al., 2019). Este tipo de modelo mecanístico é baseado nos conceitos físicos de fluxo de água e transporte de soluto e se propõe a

resolver a equação de Richards para o movimento da água, e a equação de advecção-dispersão para o transporte de solutos utilizando uma abordagem múltipla de coluna 1D (KANZARI et al., 2018). O HYDRUS 1D é um programa de modelagem gratuito, distribuído pela PC-Progress em colaboração com o Dr. van Genuchten do US Salinity Laboratory e com o Prof. Simunek da University of California Riverside (ŠIMŮNEK, J., ŠEJNA, M., SAITO, H., SAKAI, M., & VAN GENUCHTEN, 2008).

Para realizar a simulação do movimento de água no solo, o programa considera as condições de contorno e as condições iniciais que delimitam o problema, tais como as variáveis atmosféricas e de drenagem de água. A simulação de fluxo de água e transporte de solutos são baseadas no método de elementos finitos de Galerkin, possibilitando a resolução de forma simplificada de equações diferenciais relacionadas ao problema.

O movimento uniforme de água, unidimensional, em um meio poroso, parcialmente saturado é descrito por uma forma modificada da Equação de Richards, em que são desconsiderados os efeitos da fase gasosa e o efeito do gradiente térmico no fluxo da água (equação 2):

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left[ K \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} + \cos \alpha \right) \right] - S \quad (2)$$

Em que:  $\psi$  = potencial mátrico ou pressão de sucção da água no solo;  
 $\theta$  = teor volumétrico de água;  
 $t$  = tempo;  
 $x$  = coordenada espacial;  
 $S$  = termo de sumidouro;  
 $\alpha$  = ângulo entre a direção do fluxo e o eixo vertical (ou seja,  $\alpha = 0^\circ$  para fluxo vertical,  $90^\circ$  para fluxo horizontal e  $0^\circ < \alpha < 90^\circ$  para fluxo inclinado);  
 $K$  = condutividade hidráulica do solo não-saturado.

As propriedades hídricas de um solo não-saturado,  $\theta$  e  $K$  da equação 2, são funções não lineares do potencial mátrico ( $h$ ). Dentre os modelos propostos que descrevem a função de condutividade hidráulica, pode-se destacar o modelo proposto por Mualem (1976) (equação 3), sendo  $\theta_e$  definido pela equação 4. Em geral o valor de tortuosidade ( $l$ ) é considerado 0,5, conforme estudos realizados por Mualem e que melhor aproximou a função de conectividade hidráulica estudada para vários tipos de solo.

$$K(\theta) = K_s \cdot \theta_e^{1/2} \left( 1 - \left( 1 - \theta_e^{1/p} \right)^p \right)^2 \quad (3)$$

$$\theta_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \frac{1}{\left[ 1 + (\alpha_{vg} |\psi|)^q \right]^p}$$

(4)

Em que:  $\psi$  = potencial mátrico ou pressão de sucção da água no solo;  
 $K_s$  = condutividade hidráulica do solo saturado em função do espaço;  
 $\theta_r$  = teor de umidade volumétrica residual;  
 $\theta_s$  = teor de umidade volumétrica saturado;  
 $\alpha_{vg}$ , p e q = parâmetros a serem ajustados de acordo com o tipo de solo.

A partir deste modelo estatístico, van Genuchten (1980) propôs a seguinte formulação empírica para a predição dos parâmetros de retenção de água no solo. A equação proposta por van Genuchten apresenta a relação entre o teor de umidade volumétrico e a carga de pressão em solos não-saturados (equação 5)

$$\theta(\psi) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{\left[1 + (\alpha_{vg} |\psi|)^n\right]^m} \quad (5)$$

Em que:  $\psi$  = potencial mátrico ou pressão de sucção da água no solo;  
 $\theta_r$  = teor de umidade volumétrica residual;  
 $\theta_s$  = teor de umidade volumétrica saturado;  
 $\alpha_{vg}$ , m e n = parâmetros a serem ajustados de acordo com o tipo de solo.

O parâmetro m, relacionado à n e considerado um parâmetro de conectividade de poros, geralmente é estimado pela equação 6, sendo  $0 < m < 1.5$ :

$$m = 1 - \frac{1}{n} \quad (6)$$

A modelo hidráulico de van Genuchten (1980) contém quatro parâmetros independentes ( $\theta_r$ ,  $\theta_s$ ,  $\alpha$  e n) que são estimados a partir dos dados de retenção de água medidos experimentalmente, sendo  $\theta_r$  o teor de água no qual o gradiente  $\theta(h)$  tende a zero e cujo valor deve ser estimado a partir da extrapolação dos dados de retenção de água. Os parâmetros  $\alpha$  e n ( $n > 1$ ) são independentes, indeterminados e adimensionais, podendo regular a inclinação da curva de retenção. O parâmetro  $\theta_s$  é o teor de umidade do solo na condição de saturação, este valor é facilmente obtido de forma experimental.

Segundo Durner (1994) para solos de textura mais fina, como os argilosos, os métodos de estimativa de transmissão de água no solo costumam apresentar falhas devido à forma e a organização de espaços vazios que pode ser muito diferente em solos agregados quando comparado aos do tipo unimodal distribuído. Essa característica faz com que as tentativas de ajustar os seus dados de retenção com uma curva sigmoide simples apresentem resultados insatisfatórios. Durner então propôs a divisão do meio poroso em regiões sobrepostas e sugeriu utilizar uma função do tipo van Genuchten-Mualem para descrever matematicamente as propriedades hidráulicas do solo para cada região. A superposição linear de duas funções para cada uma das duas regiões específicas do meio poroso do solo fornece a função para o sistema bimodal de poros (DURNER et al., 1999).

O modelo HYDRUS-1D pode ser utilizado para simular interações adsorptivas em situações de não-equilíbrio. Assume-se que os solutos podem existir em 3 fases: líquida, sólida e gasosa. O transporte químico de soluto em situação de não-equilíbrio durante o fluxo transiente de água em um meio poroso com conteúdo de água variável é descrito por equações diferenciais parciais de primeira ordem. Nestas equações, considerando que um soluto iônico não terá partição na fase gasosa, são levadas em consideração as concentrações do soluto na fase líquida, o fluxo do solvente para cada dimensão; a densidade do solo, o coeficiente de dispersão para a fase líquida e os termos de reação quando aplicável. O programa HYDRUS 1D resolve estas equações em uma dimensão, no volume de controle selecionado. A formulação unidimensional é utilizada como uma simplificação do problema real.

### 3. METODOLOGIA

#### 3.1 Caracterização da área de estudo

Esta dissertação se baseia em um extenso estudo de campo realizado no município de Santo Antônio do Jardim, São Paulo (Figura 2). Esta cidade se encontra numa altitude de 850 metros em relação ao nível do mar, com altitude máxima de 1.317 metros e mínima de 776 metros, com as coordenadas geográficas de 22°06' - 22°11' S e 46°36' - 46°46' W. O clima da região é tropical e a precipitação anual chega a 1.577 mm, com temperatura média variando de 21,50°C a 23,3°C, na estação mais chuvosa (outubro a março) e 17,10°C a 20,80°C na estação mais seca (abril a setembro)(OLIVEIRA, 2004).

Foram utilizados dados coletados ao longo dos anos 2015 e 2016 por um projeto de pesquisa da Embrapa em parceria com uma fazenda de café especial chamada Fazenda Santana.



Figura 2. Mapa do local de estudo (Fonte: Google Maps)

O projeto teve um delineamento experimental da aplicação de fertilizantes feita em blocos inteiramente casualizados, com quatro repetições. Foram testados oito tratamentos e dez cafeeiros compunham cada parcela. Duas bordas ficaram subjacentes a cada bloco para evitar a contaminação cruzada entre os blocos, nas bordas a aplicação do fertilizante foi correspondente aos tratamentos do bloco. Como existiam dez cafeeiros por tratamento, oito delas foram utilizadas nas avaliações e as duas restantes são bordaduras entre os tratamentos.

O estudo de campo baseou-se na aplicação de diferentes fertilizantes nitrogenados em diferentes dosagens na cultura do cafeeiro variedade Catuaí Arabica. Os sete tratamentos consistiram de fertilização nitrogenada aplicada na forma de nitrato de cálcio, ureia e uma mistura de fertilizantes comercial que combina nitrato de cálcio e nitrato de amônio denominado pelo fabricante de Yara, além de um tratamento de controle sem fertilizantes nitrogenados. Foram aplicadas diferentes quantidades de fertilizantes, sendo as quantidades totais de nitrato de cálcio e ureia aplicados foram 150, 300 e 450 kgN/ha e de Yara foi 300 kgN/ha. Os fertilizantes foram aplicados manualmente na superfície do solo na projeção da copa, divididos em três aplicações de acordo com o planejamento anual, iniciando em novembro de 2015 e terminando em março de 2016, conforme descrito na Tabela 1. A primeira aplicação de fertilizante do tratamento T2, em destaque na Tabela 1, foi selecionado como dado de input para a simulação computacional por ser o  $\text{NO}_3^-$  um íon mais simples de se obter as constantes relacionadas ao transporte de soluto e por estar disponível uma quantidade de dados de campo satisfatória de concentração de nitrato na solução do solo após essa data.

O valor 120 kgN/ha foi convertido em concentração de  $\text{NO}_3^-$  a partir das informações espaciais de plantio. O fertilizante foi aplicado na superfície do solo por distribuição manual ao lados dos renques. Na área o campo experimental havia 4464 plantas por ha, em um espaçamento

de 3,2 m x 0,7 m, o que fornece uma área de 22400 cm<sup>2</sup> por cafeeiro. Dividindo os 120 kgN/ha pelo número de plantas temos tem-se 0,027 kgN por cafeeiro. Após isso divide-se o valor de 0,027 KgN por cafeeiro pela área ocupada pelo mesmo, obtendo 1,2 mgN/cm<sup>2</sup>. Considerando uma profundidade nominal mínima de 0,1 cm de aplicação de fertilizante e uma fração volumétrica de água na superfície de 0,35, tem-se um volume de água de dissolução do fertilizante de 0,035 cm<sup>3</sup> por cada cm<sup>2</sup> de solo. Correlacionando o valor 1,2 mgN/cm<sup>2</sup> com o volume de água dissolução, tem-se uma concentração de fertilizante de 34,3 mgN/cm<sup>3</sup>. Levando em conta que relação molar de nitrogênio no NO<sub>3</sub><sup>-</sup> é 1:1, a concentração foi convertida de N para NO<sub>3</sub><sup>-</sup> e a concentração de input no programa HYDRUS 1D foi de 151,8 mg NO<sub>3</sub><sup>-</sup>/cm<sup>3</sup>.

Identificação do Tratamento		Fertilizações [kgN/ha]			Total
		1º aplicação 23/11/2015	2º aplicação 18/01/2016	3º aplicação 07/03/2016	
T1	Nitrato de cálcio	60	45	45	150
T2	Nitrato de cálcio	120	90	90	300
T3	Nitrato de cálcio	180	135	135	450
T4	Ureia	60	45	45	150
T5	Ureia	120	90	90	300
T6	Ureia	180	135	135	450
T7	Yara (40-45% nítrica e 55-60% amoniacal)	60	120	120	300
T8	Controle	0	0	0	0

Tabela 1. Fertilizantes utilizados, datas das aplicações e total de N aplicado em cada tratamento.

### 3.2 Caracterização do solo

Durante o projeto de pesquisa desenvolvido pela Embrapa em parceria com a Fazenda Santana, foram realizadas coletas em novembro de 2016 de amostras de solo deformadas para determinação da granulometria e dos parâmetros químicos; e amostras de solo indeformadas, para determinação da densidade do solo, porosidade e retenção de água. As coletas de solo deformado foram realizadas por meio de trado manual nas seguintes profundidades (cm): 0-14, 14-24, 24-39, 39-60, 60-110, 110-150, 150-200. As amostras de solo indeformado em anel volumétrico foram coletadas nas profundidades de 0-14, 14-24, 39-60 e 60-110 cm. Foram utilizados cilindros de aço de 100 cm<sup>3</sup> para amostragens.

O solo da área de estudo foi caracterizado como Latossolo Vermelho Amarelo (Teixeira, comunicação pessoal), segundo as regras descritas pelo Sistema Brasileiro de Classificação de Solos (SANTOS et al., 2013).

Todas as análises de caracterização do solo foram realizadas segundo metodologia Embrapa – Manual de Métodos de Análise de Solo (TEIXEIRA et al., 2017) . As metodologias adotadas estão indicadas na Tabela 2. As análises foram conduzidas nos laboratórios da Embrapa Solos no Rio de Janeiro. Ao longo do projeto de pesquisa desenvolvido pela Embrapa em parceria com a Fazenda Santana Foram enviadas amostras aos laboratórios da Embrapa para as análises de composição granulométrica, frações cascalho e calhaus, pH, fósforo ( $P_{\text{assimilável}}$ ) e carbono orgânico. Foram executadas no laboratório de Física do Solo da Embrapa as análises de densidade aparente do solo, densidade das partículas, porosidade total, macro/microporosidade.

Parâmetro	Metodologia selecionada do manual
Composição granulométrica	Agitação lenta, método do densímetro para determinação de argila
Frações cascalho e calhaus	Preparo de amostras e separação de terra fina, cascalho e calhaus
Densidade aparente do solo	Cilindro volumétrico
Densidade das partículas	Balão volumétrico
Porosidade total	Método direto
Macro/microporosidade	Método da mesa de tensão
pH	Potenciometria
Fósforo ( $P_{\text{assimilável}}$ )	Fotometria de chama
Carbono orgânico	Titulação após oxidação com dicromato de potássio

Tabela 2. Metodologias utilizadas para determinação dos parâmetros nas amostras de solo

### 3.3 Avaliação da condutividade hidráulica saturada do solo

A condutividade hidráulica saturada foi avaliada em campo durante o projeto de pesquisa desenvolvido pela Embrapa em parceria com a Fazenda Santana. As medições de condutividade hidráulica foram feitas com permeâmetro de Guelph nas profundidades 20, 40 e 60 cm com três repetições, em três locais dentro do cafezal estudado. Duas cargas hidráulicas diferentes (5, 10 cm) foram usadas em cada teste. Os poços foram preparados com um trado. Para minimizar o efeito de escovação, uma escova dura foi usada para preparar as paredes do buraco. Os fatores de boa forma

(C1 e C2) foram calculados a partir da relação dada por Zhang (ZHANG; GROENEVELT; PARKIN, 1998).

### 3.4 Retenção de água no solo

Foram executadas análises de retenção de água no solo no laboratório de Física do Solo da Embrapa. As mesmas amostras foram usadas para determinação da densidade aparente do solo e cálculo da porosidade. As amostras foram coletadas com anel volumétrico de 100 cm<sup>3</sup>, em triplicata, nas profundidades de 0-14, 14-24, 39-60 e 60-110 cm, identificados como Horizonte Ap, A1, Bw1 e Bw2 respectivamente. Os dados foram obtidos em diferentes equipamentos para cada faixa de tensão, de acordo com a faixa de medição recomendada pelo fabricante de cada equipamento, seguindo metodologia Embrapa – Manual de Métodos de Análise de Solo (TEIXEIRA et al., 2017). Para baixas tensões baixas (inferiores a 100 cm H<sub>2</sub>O) foi empregado o método da mesa de tensão utilizando a 08.01 Sandbox (Eijkelcamp, Holanda). Para as tensões intermediárias (330, 1000 e 3000 cm H<sub>2</sub>O) foi utilizado extrator de Richards 1600 com placas cerâmicas 5 Bar (Soilmoisture, EUA). Para os pontos de alta tensão de água retida (>5000 cm H<sub>2</sub>O) o potencial hídrico foi obtido pela técnica de psicrometria, utilizando o equipamento WP4C (Meter, EUA).

Para o ajuste dos parâmetros da equação de retenção de água no solo foi selecionado o programa RETC, disponibilizado gratuitamente pela PC-PROGRESS (VAN GENUCHTEN; LEIJ; YATES, 1991). O RETC é um programa de computador amplamente usado para analisar as funções de retenção de água e condutividade hidráulica insaturada em solos, nele podem ser selecionados diversos modelos paramétricos para representar a curva de retenção e também selecionar modelos teóricos de distribuição de tamanho de poros para prever a função de condutividade hidráulica insaturada.

Os valores iniciais dos parâmetros foram obtidos utilizando o programa Rosseta (SCHAAP; LEIJ; VAN GENUCHTEN, 2001) para a classe de solo franco arenosa (sandy loam). Os valores fixados foram: umidade volumétrica saturada ( $\theta_s$ ) igual a 0,414 (horizonte A) e 0,493 (horizonte B), de condutividade hidráulica saturada ( $K_s$ ) igual a 360 cm/dia e de tortuosidade ( $l$ ) 0,5. A qualidade do ajuste foi verificada com os valores do coeficiente de determinação  $R^2$ , calculado automaticamente pelo RETC.

### 3.5 Função de captação de água pelas raízes

Para modelagem de um perfil de solo com cobertura de vegetação é necessário selecionar o tipo de modelo a ser usado para as funções de resposta das raízes à tensão de água. Foi selecionada para função de resposta ao estresse hídrico o modelo de Feddes et al (1978) com índice crítico de estresse igual a 1. Nesta função assume-se que a absorção de água seja zero perto da saturação e nas pressões maiores que o ponto de murcha, tendo uma faixa de absorção de água ótima (constante) entre esses potenciais de água no solo. Fora desta faixa ótima, a absorção de água varia linearmente com a pressão.

O programa HYDRUS 1D solicita como dado de input os parâmetros para as funções de resposta ao estresse hídrico. Não existe no banco de dados do programa os valores dos parâmetros da função de Feddes para cafeeiros, tendo sido escolhido os parâmetros utilizados para o limoeiro que constam na Tabela 3. Sendo os parâmetros da função de Feddes: P0 o valor de pressão abaixo da qual as raízes começam a extrair água do solo; P0pt o valor de pressão abaixo da qual as raízes extraem água na taxa máxima possível; P2H o valor de pressão limitante, abaixo do qual as raízes não podem mais extrair água na taxa máxima (assumindo uma taxa potencial de transpiração igual a r2H); P2L o valor de pressão limitante, abaixo do qual as raízes não podem mais extrair água na taxa máxima (assumindo uma taxa de transpiração potencial igual a r2L); P3 o valor de pressão, abaixo do qual cessa a absorção radicular de água (geralmente tomada no ponto de murchamento); r2H a taxa de transpiração potencial definida em 0,5 cm/dia e r2L a taxa de transpiração potencial definida em 0,1 cm/dia.

Parâmetros de Feddes [cm]	
P0	-10
P0pt	-25
P2H	-400
P2L	-400
P3	-8000

Tabela 3. Parâmetros da função de Feddes selecionados no banco de dados do software

A distribuição espacial das raízes do cafeeiro usada na simulação foi de 60 cm de profundidade, com distribuição linear decrescente a partir do topo, baseado no estudo realizado por Barreto et al. (2006).

### 3.6 Dados de entrada do HYDRUS 1D

Para as simulações de fluxo unidirecional vertical de água no HYDRUS 1D, foi adotado a solução direta do problema. Foram selecionados os módulos de simulação de fluxo de água, captação de água pelas raízes e transporte de soluto. As unidades padrão escolhidas foram cm (dimensões de comprimento e volume) e dia (dimensão de tempo).

O desempenho do modelo foi avaliado com base na análise dos resíduos e resíduos padronizados (resíduos normalizados pelo desvio padrão) e do erro médio quadrático (RMSE). A análise dos resíduos visa investigar a adequabilidade de um modelo de regressão com base nos resíduos, sendo o resíduo dado pela diferença entre a variável observada e a variável estimada. Se o modelo for apropriado, os resíduos devem apresentar variância constante e não apresentar dados discrepantes (outliers)(HALLAK; PEREIRA FILHO, 2012).

Para esta análise foi utilizada técnica gráfica através da plotagem do gráfico dos resíduos versus valores ajustados e do gráfico dos resíduos padronizados (resíduos normalizados pelo desvio padrão) versus valores ajustados. No gráfico de resíduos padronizados espera-se que 68% dos resíduos padronizados caiam no intervalo -1 e +1 e 95% caiam no intervalo -2 e +2. Valores fora do intervalo -3 e +3 são suspeitos de serem outliers (PEDRINI; TEN CATEN, 2008).

O RMSE é um parâmetro estatístico comumente usado para expressar a acurácia dos resultados estimados por cálculos numéricos, apresentando valores do erro nas mesmas dimensões da variável analisada (HALLAK; PEREIRA FILHO, 2012). Além disso, o RMSE é associado a magnitude média dos erros dos dados estimados e tem sempre valor positivo. Quanto mais próximo de zero, maior a qualidade do ajuste dos valores estimados (ALVES; VECCHIA, 2011).

O perfil de solo foi descrito com uma profundidade total de 110 cm, com dois materiais distintos que correspondem ao horizonte A (0-24 cm) e ao horizonte B (24 -110 cm). Porém foi selecionado apenas um balanço de massa englobando todo o perfil.

Os nós de observação foram inseridos nas mesmas profundidades onde temos dados de umidade do solo medidos no campo: 10 cm e 50 cm. Outros dois nós de controle foram inseridos: 0 cm (superfície) e 110 cm (fundo do perfil).

O tempo de simulação foi de 92 dias, correspondendo os meses de Novembro de 2015 a Janeiro 2016. Este período foi selecionado por abranger o período em que existem dados medidos disponíveis.

A adição de  $\text{NO}_3^-$  através das fertilizações foi modelada como um pulso de duração de um dia, terminando em 23 de novembro de 2015.

### 3.6.1 Parâmetros de transporte de solutos

Para modelar o transporte de soluto foi selecionada como unidade de concentração  $\text{mg}/\text{cm}^3$  e o modelo de transporte de soluto com equilíbrio químico. Foi necessário definir os valores de coeficiente de distribuição ou coeficiente de partição sólido-líquido ( $K_d$ ), constantes empíricas dos modelos de sorção  $\eta$  e  $\beta$ , difusividade ( $D_w$ ) e do parâmetro específico de dispersividade ( $\lambda$ ) do solo.

Na sorção do soluto na fase sólida do solo de equilíbrio linear e os solutos são instantaneamente sorvidos para a fase sólida. O estudo deste fenômeno exige o conhecimento de aspectos químicos e termodinâmicos relacionados a migração destes solutos pelo meio poroso. O programa HYDURS 1D solicita como dados de alguns parâmetros que descrevem essas propriedades. Visto que o movimento de solutos no solo predominantemente tem seu transporte de massa afetado pelos processos de adsorção, foi necessário obter os seguintes parâmetros: coeficiente de distribuição ou coeficiente de partição sólido-líquido ( $K_d$ ), constantes empíricas dos modelos de sorção  $\eta$  e  $\beta$ , dispersividade ( $\lambda$ ) e difusividade ( $D_w$ ).

#### 3.6.1.1 Obtendo o valor de $\lambda$

A dispersividade é um parâmetro revelante em estudos da migração de soluto. Em estudos preliminares recomenda-se usar valores aproximados de  $\lambda$  igual a 10% da profundidade total do perfil de solo que está sendo modelado (RASSAM et al., 2018). Foi usado então o valor de 11 cm.

#### 3.6.1.2 Obtendo o valor de $D_w$

Pode-se pensar no fenômeno físico envolvido para obter um valor aproximado para o coeficiente de difusão molecular em fase líquida. Na maioria dos casos pode-se considerar que  $D_w$  é igual a zero, significando que este fenômeno é considerado negligenciável no processo de transporte de solutos no solo. Esta aproximação é aceitável visto que, na maioria das aplicações, o valor de  $D_w$  é significativamente muito menor do que  $\lambda$ , indicando uma baixa contribuição desse fenômeno no processo. Outra aproximação bastante plausível seria adotar o valor de  $D_w$  igual a  $1 \text{ cm}^2/\text{dia}$ , que constitui uma boa aproximação para o valor real da maioria dos solutos (RASSAM et al., 2018).

Para este trabalho buscou-se valores tabelados na literatura para a difusividade do  $\text{NO}_3^-$ , sendo este o modo mais preciso de obter este coeficiente. Forde e Clarkson (1999) relatam que o coeficiente de difusão do  $\text{NO}_3^-$  é aproximadamente  $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$  devido a esse íon fazer muito poucas interações com a matéria orgânica ou com a argila do solo, sendo considerado um íon muito móvel. O valor de  $D_{\text{wNO}_3^-}$  à  $25^\circ\text{C}$  fornecido pela *United States Environmental Protection Agency* (EPA) (EPA, 2018, online) igual  $1,96 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ , sendo necessária a conversão para as unidades selecionadas na modelagem, de modo que o valor se torna igual a  $1,69 \text{ cm}^2/\text{dia}$ . A avaliação destes valores da literatura mostra que, no caso do estudo de lixiviação de nitrato, a simplificação de adotar o valor de  $D_w$  igual a  $1 \text{ cm}^2/\text{dia}$  também seria apropriada.

### 3.6.1.3 Obtendo os valores de $\eta$ , $\beta$ e $K_d$

Os processos de sorção são representados pelo seguinte modelo apresentado na equação 7 :

$$S = \frac{K_d C^\beta}{1 + \eta C^\beta} \quad (7)$$

Neste a concentração adsorvida na fase sólida ( $S$ ) é função da concentração remanescente na fase líquida ( $C$ ),  $K_d$ ,  $\beta$  e  $\eta$ .

O  $K_d$  representa matematicamente a adsorção linear no equilíbrio. É um fator que reflete a distribuição linear da sorção e correlaciona a concentração adsorvida na fase sólida e a concentração na fase líquida. Este parâmetro tem correlação com a capacidade de um solo em reter o soluto e a sua mobilidade em fase líquida. Quanto maior a capacidade adsorviva do solo, maior será o valor de  $K_d$ . Quando a isoterma de adsorção pode ser considerada linear, usa-se apenas este parâmetro para descrever o fenômeno (SCHMAL, 2017).

$\beta$  e  $\eta$  são constantes empíricas ou quase empíricas do processo de sorção. O parâmetro  $\eta$  indica a afinidade (energia de ligação) por sítios de troca e decresce exponencialmente com o aumento da adsorção (SCHMAL, 2017). As curvas geradas por esta equação são chamadas isotermas de sorção.

Em geral os processos de adsorção em meios porosos obedecem modelos de isotermas de adsorção não lineares (não idealizadas). O modelo de adsorção não linear de Freundlich admite uma distribuição logarítmica de sítios ativos e admite adsorção em multicamadas. Neste modelo assume-se que  $\eta$  é igual a zero e a equação 8 passa a ser:

$$S = K_d \cdot C^\beta \quad (8)$$

Estudos relatam que a adsorção de nitrato no solo se ajusta bem ao modelo de Freundlich (ALCANTARA; CAMARGO, 2005; BLACK; WARING, 1976). Alcantara e Camargo (2005) obtiveram os valores apresentados na Tabela 4 para parâmetros do modelo de Freundlich para os horizontes A e B em Latossolo Vermelho Acriférrico. Estes parâmetros da literatura foram selecionadas para serem usados na modelagem de lixiviação de  $\text{NO}_3^-$ , após as devidas conversões de unidades para se ajustarem ao programa.

Horizonte	$K_d$ [ $\text{mol}^{(1-n)} \cdot \text{m}^{3(n-1)}$ ]	$n^*$
A	$0,358 \times 10^{-6}$	3,710
B	$0,689 \times 10^{-6}$	3,066

Tabela 4. Valores da literatura dos parâmetros da isoterma de Freundlich para o nitrato em Latossolo Vermelho.  $*\beta = 1/n$ .

### 3.6.1 Condições iniciais

#### 3.6.1.1 Condições iniciais de umidade do solo

No programa, se especifica as condições iniciais para o fluxo de água definindo a sua variação espacial, que pode ser especificada em termos do potencial ou da umidade volumétrica. Foi selecionado expressar as condições iniciais em teor de água ao longo do perfil de solo por existirem dados de campo medidos. No campo foram instalados sensores de conteúdo de água no solo baseados em avaliações da Frequência no Domínio do Tempo (FDR) GS3 (Decagon, EUA) instalados nas profundidades de 10 cm e 50 cm. Os dados eram armazenados em datalogger CR1000 (Campbell, EUA) e enviados por um sistema de telemetria composto de um modem GPRS e antena direcional a um diretório ftp no qual ficavam disponíveis para download.

Foi feita uma ponderação a partir dos dados medidos e foi selecionada como condição inicial no perfil de solo a umidade de  $0,40 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$  na superfície e  $0,34 \text{ cm}^3/\text{cm}^3$  no final do perfil (110 cm de profundidade). O editor gráfico do programa promove um gradiente de teor de água ao longo do perfil de solo a partir destes dados inseridos.

#### 3.6.1.2 Condições iniciais de concentração de soluto

É necessário especificar a condição inicial para o transporte de soluto, definindo a distribuição espacial inicial da concentração de  $\text{NO}_3^-$  na solução do solo, que foi assumida nula ao longo de todo perfil do solo.

### 3.6.2 Condição de contorno do soluto

A condição de contorno de topo do soluto selecionada foi em concentração, sendo considerada como a concentração de fertilizante aplicada calculada a partir dos dados de aplicação do fertilizante de  $151,8 \text{ mg NO}_3^-/\text{cm}^3$ , com pulso de um dia terminando em 23 de novembro de 2015 na tabela de condições de contorno variáveis com o tempo.

A condição de contorno de fundo selecionada foi zero concentração de soluto.

### 3.6.3 Condição de contorno variável no tempo

O mesmo período citado acima (92 dias) foi considerado para as condições de contorno, sendo selecionado o modo de simulação com condição de contorno variável no tempo como entrada diária em igual período. Os dados microclimáticos foram coletados por uma microestação meteorológica composta de um coletor de dados CR1000 (Campbell, EUA), alimentado por um sistema fotovoltaico bateria de 70aH + painel solar de 40 W, no qual estavam ligado a os seguintes sensores: um sensor de temperatura e umidade relativa do ar CS215 (Campbell, EUA), um sensor de velocidade e direção dos ventos RM 05103 (Campbell, EUA), um sensor de radiação solar global LI 200x e um de radiação solar fotossinteticamente ativa SQ-110 (Campbell, EUA) e um pluviômetro de alta intensidade TB4 (Texas Instrument, EUA). Os dados eram enviados por um sistema de telemetria composto de um modem GPRS e antena direcional a um diretório ftp no qual ficavam disponíveis para download.

O tipo de condição de contorno de fundo (ponto mais profundo do perfil de solo) selecionada foi drenagem livre. Essa condição foi selecionada por ser mais apropriada para situações em que o lençol freático está muito abaixo da profundidade máxima simulada no perfil de solo. Sendo uma condição comum em estudos de campo de fluxo de água e drenagem.

O tipo de condição de contorno de topo (superfície do solo) selecionada foi de dado atmosférico com camada de água na superfície em caso de acúmulo. A escolha dessa condição de contorno no topo do perfil de solo visa avaliar a variação do conteúdo de água levando em conta os dados diários de precipitação. Nesse modelo, em caso de chuva excessiva, a água se acumula na

superfície do solo. A altura da camada superficial de água aumenta e reduz de acordo com as taxas de precipitação, infiltração e evapotranspiração. Para assegurar a convergência dos dados em torno de valores que refletem a realidade, é necessário selecionar a altura máxima permitida de água acumulada. Nessa modelagem foi selecionada a altura máxima de água na superfície do solo de 10 cm. Esta condição requer que se especifique posteriormente os fluxos de superfície variáveis no tempo: taxas de precipitação e evapotranspiração.

### 3.6.3.1 Precipitação e precipitação efetiva

Como as condições de contorno atmosféricas variam com tempo e estão disponíveis dados diários coletados por uma estação micrometeorológica instalada no campo experimental, foram adicionadas 92 linhas de registros de dados atmosféricos no programa.

A partir dos dados de precipitação fornecidos registrados na estação micrometeorológica, foram calculados os valores diários de precipitação efetiva conforme a equação 9 abaixo:

$$P_E = P_T \cdot (1 - P_i) \quad (9)$$

Sendo os termos da equação:  $P_E$  (cm) a precipitação efetiva,  $P_T$  (cm) a precipitação total obtida em campo e  $P_i$  a fração de chuva interceptada (baseada na porcentagem de interceptação a pelo vegetal). De acordo com os resultados obtidos por Miranda et al (2004), em média 19% da chuva é interceptada um cafeeiro adulto. Este valor da literatura foi usado para o cálculo de  $P_E$ . Os valores de  $P_T$  e os valores calculados de  $P_E$  são apresentados na Tabela 16.

### 3.6.3.2 Evapotranspiração

Para estimar as taxas de evapotranspiração do cafeeiro, primeiramente foi realizada uma estimativa da evapotranspiração de referência ( $ET_o$ ) para posteriormente estimar a evapotranspiração da cultura do café ( $ET_c$ ).

A  $ET_o$  foi calculada pelo método de Penman-Monteith (ALLEN et al., 1998), utilizando os dados das variáveis climatológicas diárias da estação micrometeorológica instalada no campo experimental. Os dados de  $ET_c$  foram calculados com periodicidade diária.

A  $ET_c$  foi calculada considerando os valores diários de  $ET_o$  multiplicada pelo coeficiente da cultura ( $K_c$ ), conforme a equação 10 abaixo. Foram usados os valores de  $K_c$  relatados na literatura

por Silva et al. (2011), sendo adotado o valor de 1,1 para os meses de novembro e dezembro de 2015 e o valor 1 para janeiro de 2016.

$$ET_c = ET_o \cdot K_c \quad (10)$$

No programa HYDRUS 1D a evapotranspiração é dividida em evaporação e transpiração, os resultados de  $ET_c$  calculados tiveram que ser inseridos na tabela de condições atmosféricas na coluna correspondente à transpiração do vegetal, deixando os valores de evaporação nulos.

Os valores de  $ET_o$  e de  $ET_c$  calculado são apresentados na Tabela 16- Apêndice A.

### **3.7 Modelagem inversa para validação dos dados**

Para a validação dos dados de saída de umidade do solo foi feita uma nova modelagem no HYDRUS 1D, para este fim foi adotado o modo de solução inversa do problema. A simulação do umidade do solo de forma inversa foi realizada utilizando o conteúdo volumétrico de água medido em campo, com dados dos sensores de umidade nas profundidades de 10 cm e 50 cm.

A Tabela 17 - Apêndice B - apresenta os valores usados na simulação inversa. A coleta de dados era diária e os dados eram enviados por um sistema de telemetria composto de um modem GPRS e antena direcional a um diretório ftp no qual ficavam disponíveis para download.

O desempenho da modelagem inversa também foi avaliado com base na análise dos resíduos e resíduos padronizados (resíduos normalizados pelo desvio padrão) e do erro médio quadrático (RMSE).

## 4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 4.1 Caracterização do solo

A Tabela 5 apresenta os resultados das determinações granulométricas, onde se verifica que o solo da área estudada apresenta textura argilosa e franco-argilosa, com teores de argila que variando entre 223 e 492 g kg<sup>-1</sup>, com tendência a apresentar maiores teores em profundidade, indicando a presença de um pequeno gradiente textural. Quanto às frações de areia, observa-se um leve predomínio de areia grossa (variando entre 211 e 436 g kg<sup>-1</sup>) com teores diminuindo em profundidade.

Os dados de densidade aparente e porosidade do solo estão descritos na Tabela 6. Os menores valores de porosidade foram observados nos horizontes que apresentaram os maiores valores de densidade do solo.

A Tabela 7 apresenta os parâmetros químicos quantificados para os horizontes do solo estudado. Os valores de pH em água variaram entre 5,0 e 5,3. A presença de grande quantidade de fósforo em superfície indica adição deste nutriente por adubação. Os horizontes superficiais (A) apresentaram maiores teores de carbono que os demais.

A caracterização do solo está de acordo com o esperado para os Latossolos Vermelho Amarelo que normalmente são solos de textura média, profundos e moderadamente a bem drenados, com pH entre 5,0 – 6,5 (SANTOS et al., 2013).

Identificação		Frações da amostra			Composição granulométrica				
Horizonte	Profundidade	Calhaus	Cascalho	Terra fina	Areia grossa	Areia fina	Silte	Argila	Classe textural
	[cm]								
Ap	0-14	0	35	965	436	126	194	244	franco-argilo-arenosa
A1	14-24	0	56	944	404	126	186	284	franco-argilo-arenosa
BA	24-39	0	77	923	330	118	186	366	franco-argilosa
Bw1	39-60	0	38	962	219	76	234	471	argila
Bw2	60-110	0	33	967	211	76	221	492	argila
Bw3	110-150	0	32	968	282	86	306	326	franco-argilosa
Bw4	150-200	0	31	969	306	110	361	223	franca

Tabela 5. Resultados da caracterização granulométrica do solo.

Horizonte	Profundidade	Densidade do solo	Densidade de Partículas	Porosidade Total	Micro porosidade	Macro porosidade
	[cm]	[g/cm <sup>3</sup> ]			[%]	
Ap	0-14	1,63	2,74	41	32	9
A1	14-24	1,61	2,74	41	34	8
Bt1	39-60	1,46	2,74	47	39	8
Bt2	60-110	1,38	2,69	49	41	8

Tabela 6. Resultados de caracterização das amostras de solo indeformadas

Horizonte	Profundidade	pH		P <sub>assimilável</sub>	Carbono orgânico
		Água	KCl 1N		
	[cm]			[mg/kg]	[g/kg]
Ap	0-14	5,3	4,6	101	8,1
A1	14-24	5,2	4,4	17	7,0
E	24-39	5,3	4,5	1	3,7
Bt1	39-60	5,2	4,7	1	3,7
Bt2	60-110	5,2	4,7	1	3,3
Bt3	110-150	5,1	4,5	1	2,1
Bt4	150-200	5,0	4,4	1	1,3

Tabela 7. Resultados da caracterização química de amostra de solo de um cafezal em Santo Antônio do Jardim - SP

#### 4.2 Condutividade hidráulica saturada do solo

A Tabela 8 apresenta os valores de K<sub>s</sub> calculados a partir dos dados experimentais.

	Profundidade		
	[cm]		
	20	40	60
	K <sub>s</sub>		
	[cm/dia]		
Repetição 1	0,30	0,42	12,51
Repetição 2	28,80	0,66	41,01
Repetição 3	0,45	0,10	0,55
Média	9,85	0,39	18,03
Desvio Padrão	16,41	0,28	20,79
Coefficiente de Variação	166,57	71,90	115,32

Tabela 8. Condutividade hidráulica saturada obtida em um Latossolo Vermelho Amarelo em Santo Antônio do Jardim - SP

Os resultados de condutividade hidráulica saturada apresentam grande variabilidade. Esse comportamento é comum nas medições experimentais deste parâmetro, sendo aceito que a condutividade hidráulica é um dos parâmetros mais variáveis do solo. Os coeficientes de variação obtidos nas medições experimentais de  $K_s$  se encontram dentro da faixa de valores mencionados na bibliografia (BOSCH; WEST, 1998; NIELSEN; BIGGAR; ERH, 2014; PAZ GONZÁLEZ et al., 2001; WILDING; DREES, 1983).

A condutividade hidráulica é uma propriedade que expressa a facilidade com que a água se movimenta no solo (GONÇALVES; LIBARDI, 2013). Os Latossolos em algumas regiões, mesmo tendo alto teor de argila, podem apresentar grande permeabilidade em decorrência de sua estrutura caracterizada pela alta flocculação de argilas, fazendo com que os fluxos em solos saturados e próximos da saturação sejam próximos aos de solos arenosos (TEIXEIRA, 2001).

### **4.3 curvas de retenção de água no solo**

As propriedades hidráulicas são parâmetros chave em qualquer descrição quantitativa do fluxo de água no solo. Os dados experimentais avaliados de umidade volumétrica do solo em cada potencial são apresentados na Tabela 9.

Umidade volumétrica - Mesa de Tensão [cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ]							
Potencial [cm]	Ap	A1	Bt1	Bt2			
0	0,439	0,428	0,442	0,470			
0	0,409	0,414	0,486	0,494			
0	0,405	0,462	0,478	0,512			
10	0,333	0,333	0,366	0,401			
10	0,315	0,332	0,399	0,416			
10	0,300	0,344	0,408	0,419			
33	0,321	0,310	0,353	0,392			
33	0,314	0,317	0,380	0,402			
33	0,300	0,303	0,379	0,406			
62	0,305	0,296	0,339	0,372			
62	0,305	0,301	0,364	0,377			
62	0,300	0,285	0,364	0,394			
100	0,297	0,292	0,331	0,360			
100	0,297	0,295	0,354	0,365			
100	0,296	0,281	0,355	0,380			
Umidade volumétrica - Extrator de Richards [cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ]							
Potencial [cm]	Ap	A1	Bt1	Bt2			
330	0,276	0,273	0,315	0,338			
330	0,276	0,276	0,338	0,339			
330	0,280	0,263	0,338	0,350			
1000	0,258	0,252	0,302	0,319			
1000	0,251	0,256	0,323	0,320			
1000	0,257	0,243	0,325	0,328			
3000	0,247	0,240	0,289	0,313			
3000	0,239	0,245	0,314	0,308			
3000	0,245	0,231	0,315	0,317			
Umidade volumétrica - Psicrômetro WP4C [cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ]							
Potencial [cm]	Ap	Potencial [cm]	A1	Potencial [cm]	Bt1	Potencial [cm]	Bt2
5405	0,272	6526	0,298	7852	0,310	7750	0,282
19477	0,147	21415	0,175	18049	0,224	41810	0,180
4181	0,277	7750	0,252	8668	0,286	9280	0,272
17336	0,162	17336	0,167	57208	0,164	40076	0,202
6730	0,280	6934	0,240	9790	0,311	3263	0,331
15704	0,187	19171	0,148	19375	0,250	35283	0,194

Tabela 9. Dados experimentais para construção da curva de retenção

Após a plotagem da dispersão de pontos experimentais foi observado que os horizontes tipo A e tipo B apresentavam similaridades hidráulicas (Tabela 10), logo apresentariam comportamento de fluxo afim. Foram então agrupados os dados experimentais dos horizontes Ap e A1 - agora denominado horizonte tipo A – e dos horizontes Bw1 e Bw2 - agora denominado horizonte tipo B. Esta abordagem visa simplificar a interpretação do comportamento de fluxo no solo, passando assim diferenciar apenas 2 camadas hidraulicamente distintas na simulação computacional.

Potencial [cm]	Umidade volumétrica média [cm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> ]			
	Ap	A1	Bw1	Bw2
0	0.418 ± 0.019	0.435 ± 0.025	0.469 ± 0.023	0.492 ± 0.021
10	0.316 ± 0.017	0.336 ± 0.007	0.391 ± 0.022	0.412 ± 0.010
33	0.312 ± 0.011	0.310 ± 0.007	0.371 ± 0.015	0.400 ± 0.007
62	0.303 ± 0.003	0.294 ± 0.008	0.356 ± 0.014	0.381 ± 0.012
100	0.297 ± 0.001	0.289 ± 0.007	0.347 ± 0.014	0.368 ± 0.010
330	0.277 ± 0.002	0.271 ± 0.007	0.330 ± 0.013	0.342 ± 0.007
1000	0.255 ± 0.004	0.250 ± 0.007	0.317 ± 0.013	0.322 ± 0.005
3000	0.244 ± 0.004	0.239 ± 0.007	0.306 ± 0.015	0.313 ± 0.005
10000	0.233 ± 0.009	0.237 ± 0.014	0.295 ± 0.013	0.283 ± 0.015
15000	0.186 ± 0.007	0.196 ± 0.015	0.266 ± 0.016	0.267 ± 0.011

Tabela 10. Pontos de retenção de água no solo de cada horizonte de solo coletado

Foram então obtidos numericamente os parâmetros da curva de retenção de água no solo de duas camadas: horizonte A (correspondendo aos horizontes Ap e A1) e horizonte B (correspondendo aos horizontes Bw1 e Bw2).

Foram feitas tentativas de ajuste da curva ao modelo de comportamento hidráulico de van Genuchten (unimodal), entretanto não houve um ajuste satisfatório (Tabela 11), optando-se por fazer o ajuste bimodal que apresentou melhores coeficientes de determinação (Tabela 12). Solos estruturados, como o Latossolo Vermelho, podem apresentar comportamento bimodal da distribuição de poros. Este comportamento se deve a mineralogia da fração argila e a estrutura granular presente nestes solos, que apresentam elevado volume de poros grandes e elevado volume de poros extremamente pequenos, não apresentando significativo volume de poros intermediários (CARDUCCI et al., 2011; ZHANG; CHEN, 2005). Geralmente uma distribuição poros bimodal

está associada a uma curva bimodal de retenção de água no solo (SATYANAGA et al., 2013). Essas duas classes de poros promove dois comportamentos distintos: os poros muito grandes estão relacionados à rápida drenagem interna do solo; e os poros muito pequenos estão relacionados à água retida com energia muito alta, a água higroscópica. Isto faz com que o solo se comporte como areia em termos de movimento da água em baixas tensões, mas mantenha a água retida como argila em tensões mais altas (CARDUCCI et al., 2011; SANCHEZ, 1977).

	Parâmetros da curva unimodal					
	$\theta_s$	$\theta_r$	$\alpha$	n	m	$R^2$
Horizonte A	0.414	0.000	3.244	1.061	0.058	0.863
Horizonte B	0.493	0.000	1.487	1.063	0.060	0.879

Tabela 11. Parâmetros de van Genuchten (unimodal) da curva de retenção de água no solo

Vários modelos foram propostos para descrever solos de distribuição de porosidade bimodal ou multimodal, objetivando descrever as curvas características solo-água. Durner (1994) ampliou o modelo unimodal van Genuchten-Mualem (van Genuchten 1980) para se ajustar às funções de retenção de água bimodal e multimodal, introduzindo fatores de ponderação para combinar funções individuais. Os fatores de ponderação foram determinados pelo melhor ajuste das funções de retenção de água medidas. Foi selecionado então o modelo de comportamento hidráulico bimodal de Durner sem histerese (DURNER, 1994; VAN GENUCHTEN, 1980), acoplado ao modelo de Mualem para descrever a condutividade de água não saturada do solo (MUALEM, 1976).

O programa RETC fornece como dados de saída os valores ajustados dos parâmetros da curva de retenção para solos com comportamento bimodal: umidade volumétrica residual ( $\theta_r$ ) e parâmetros adimensionais  $\alpha$ , n, m,  $\alpha_2$ ,  $n_2$  e  $w_2$ . A umidade volumétrica saturada ( $\theta_s$ ) foi fixada pelo valor médio medido para a tensão zero. A Tabela 12 apresenta os parâmetros ajustados e o coeficiente de determinação do ajuste da curva (Figura 3).

Parâmetro	$\theta_s$	$\theta_r$	$\alpha$	n	m	$w_2$	$\alpha_2$	$n_2$	$R^2$
Horizonte A	0,41	0,00	0,00	3,40	0,71	0,45	2,40	1,20	0,94
Horizonte B	0,49	0,10	0,00	1,95	0,49	0,48	0,30	1,41	0,94

Tabela 12. Curva de retenção de água de horizontes de solos de um Latossolo Vermelho Amarelo de Santo Antônio do Jardim – SP

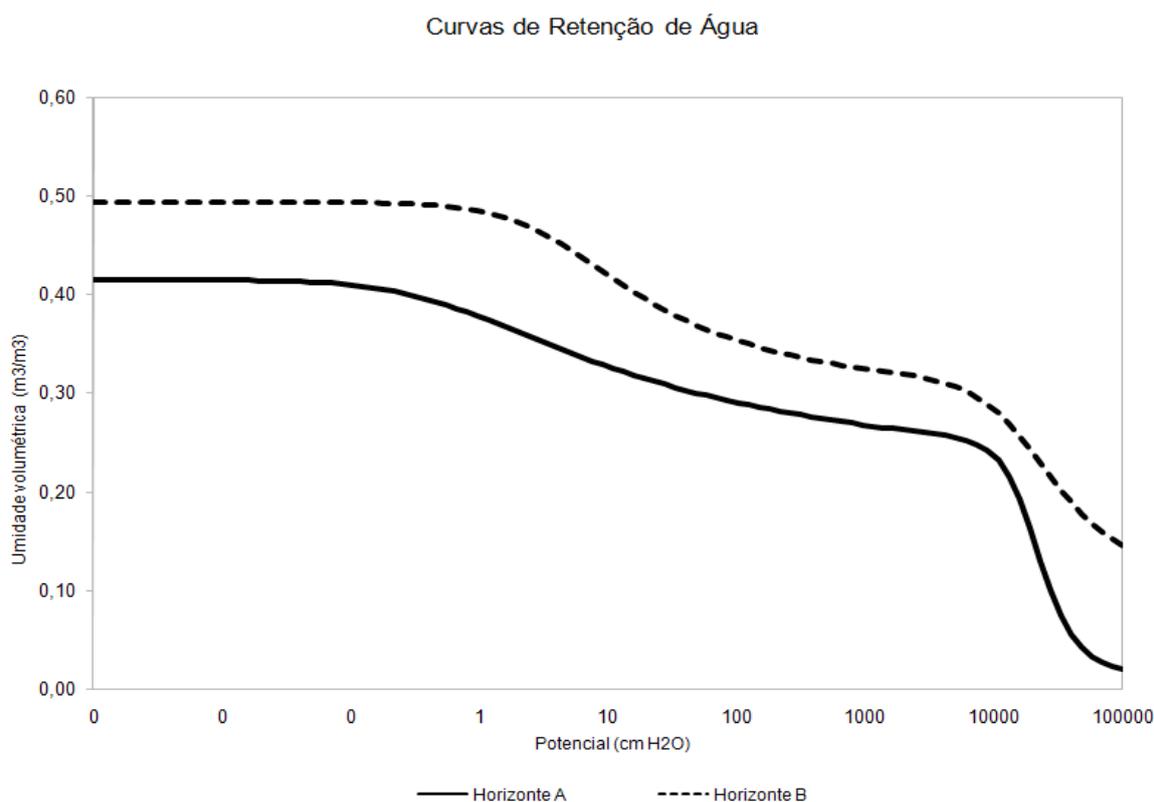


Figura 3. Curvas de retenção de água ajustadas pelo programa RETC

#### 4.4 Dinâmica de água no perfil de solo

##### 4.4.1 Dados estimados por simulação computacional no HYDRUS 1D

A Figura 4A e B apresenta a comparação entre os valores medidos e estimados da umidade volumétrica nessas duas profundidades. Os dados de precipitação efetiva foram plotados em sequência para visualização do regime hídrico do solo (Figura 4C). Como os dados medidos em campo de teor de água no solo nas profundidades de 10 cm e 50 cm, no programa de simulação foram colocados nós de observação nestas mesmas posições do perfil de solo simulado.

Os gráficos mostram que há coerência entre os dados estimados pelo modelo computacional de teor de água no solo e o regime de chuvas no período estudado. Nos períodos de maior pluviosidade e, conseqüentemente maior precipitação efetiva, são observados os maiores valores no teor de água estimado tanto na profundidade de 10 cm como na profundidade de 50 cm. Este comportamento pode ser claramente observado no dia 10, no dia 40 e no período que abrange os dias 76 a 80, sendo estes últimos os dias de maior pluviosidade no período modelado.

Nestes períodos de grande pluviosidade em dias consecutivos se espera que a umidade do solo permaneça alta. O modelo conseguiu descrever este comportamento esperado de forma satisfatória, apresentando os maiores teores de água nos dias subsequentes a essas chuvas mais intensas (dia 79 até dia 82).

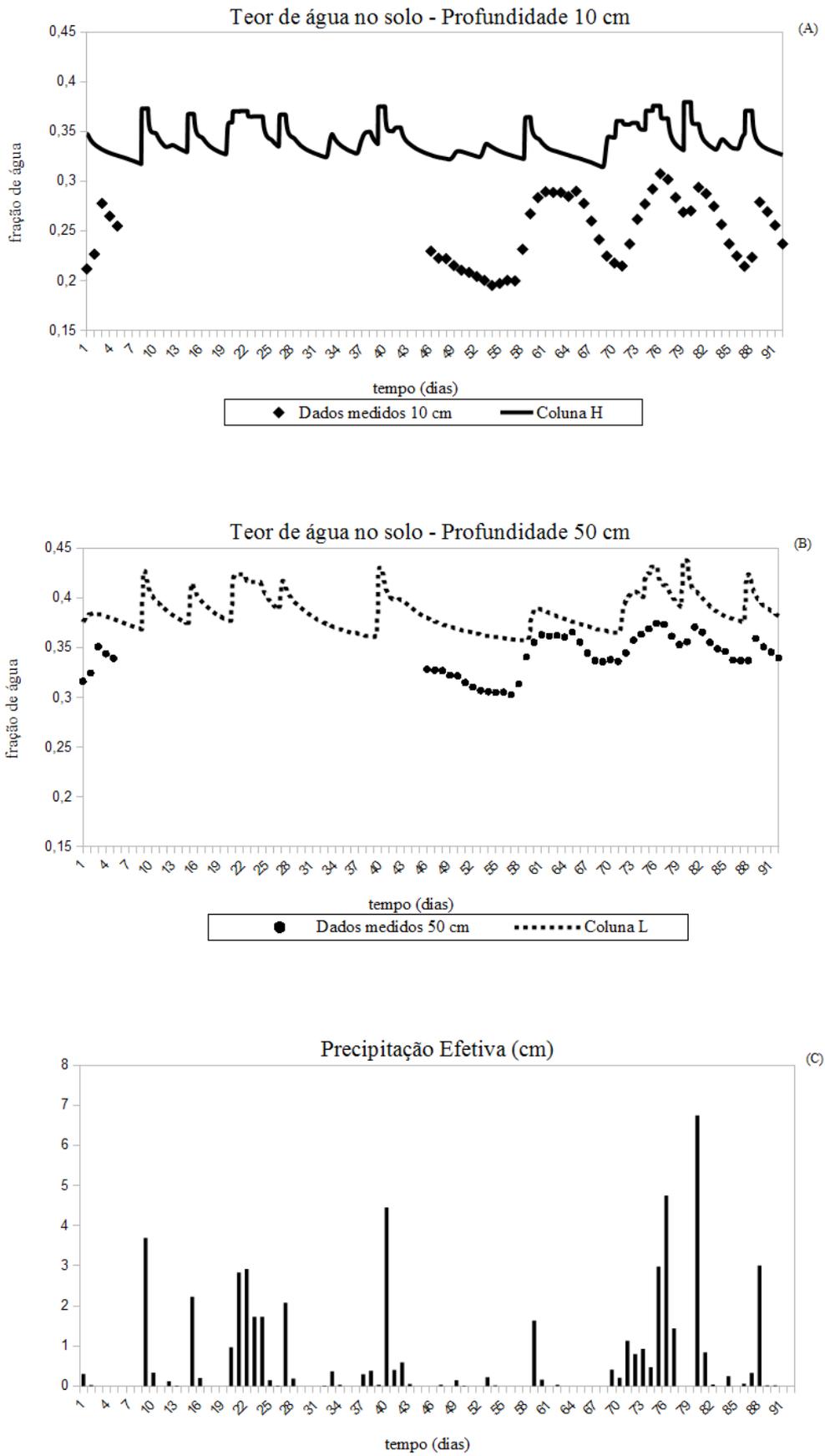


Figura 4. Valores medidos e estimados de teor de água no solo nas profundidades de 10 cm (A), de 50 cm (B) e a precipitação efetiva diária calculada (C)

Para avaliar o ajuste dos dados estimados pela modelagem aos dados experimentais medidos foi feita a análise dos resíduos. A Figura 5A e B apresenta os diagramas de distribuição dos resíduos para as duas profundidades estudadas. Além disso, os diagramas de resíduos padronizados para as duas profundidades estudadas estão apresentados na Figura 5C e D.

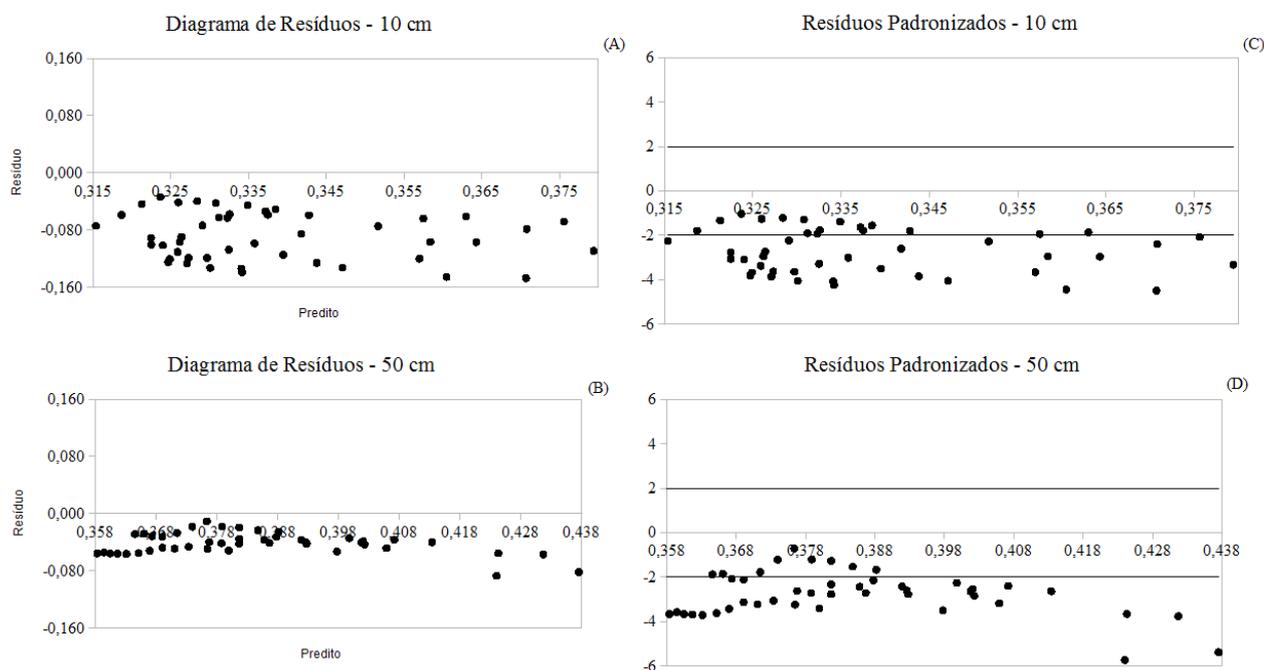


Figura 5. Diagramas de distribuição dos resíduos a (A) 10 cm e (B) 50 cm e diagramas de distribuição de resíduos padronizados a (C) 10 cm e (D) 50 cm

Os resíduos, em vez de estarem dispersos aleatoriamente em torno de zero, se apresentam com distribuição fortemente assimétrica negativa, o que indica uma superestimação dos dados estimados em relação aos dados medidos. Outra característica observada nos resíduos é que, na profundidade 50 cm, o ajuste matemático resultou em resíduos maiores para valores maiores de teor de água, indicando que o modelo não é bem ajustado nesta região (Figura 5A e B). A partir destes resíduos foi calculado também o erro médio quadrático (*Root Mean Square Error - RMSE*). Existem dias sem dados de teor de água no solo medidos em campo devido à falha no instrumento instalado. Portanto, para a análise de resíduos foi considerado apenas o período entre os dias 46 e 92. O RMSE calculado resultou em um valor de 0,09 tanto para 10 cm como para 50 cm.

Os resíduos padronizados também indicam que o modelo não está bem ajustado aos dados experimentais. Os resíduos padronizados reproduzem a assimetria negativa já relatada. Eles também não estão concentrados entre -2 e 2, como seria desejável, apresentando valores muito maiores em

módulo. A presença de muitos resíduos padronizados extremos (*outliers*) fora da região entre -3 e 3 indica que o modelo computacional preditivo ainda precisa de ajustes (Figura 5C e D).

Mesmo o RMSE tendo apresentado um resultado satisfatório, a análise de resíduos demonstrou um grande desvio do modelo em relação aos dados experimentais, indicando que o processo de modelagem computacional não foi eficiente.

Para o estudo e compreensão do processo de lixiviação de  $\text{NO}_3^-$ , o mais relevante é compreender a dinâmica da água do solo, visto que a concentração e mobilidade de nitrato dependem fortemente disso (FESSEHAZION et al., 2015). Estudos mostram que a lixiviação de N está significativamente correlacionada com o volume de água percolada a ao longo do perfil do solo, isto é, a taxa de precipitação ou o nível de irrigação. A quantidade de N lixiviado aumenta com a precipitação e é mais dependente do volume de água percolado através do solo do que da quantidade de N aplicada (BLICHER-MATHIESEN; ANDERSEN; LARSEN, 2014; GIBERTO; LIBARDI; TRIVELIN, 2015; WETSELAAR, 1962).

A taxa de lixiviação de N acompanha o regime de chuvas e a quantidade de N lixiviado diminui ou aumenta na mesma proporção da precipitação (CAMERON; DI; MOIR, 2013; ZHANG et al., 2017). Blicher-Mathiesen et al. (2014) relatam em um estudo de longo prazo que a variação anual na percolação de água explicou 98 e 45% da variação anual da concentração de N para os períodos de 1991-1993 e 1994-2010, respectivamente. Logo, uma das recomendações na literatura para reduzir a perda por lixiviação de  $\text{NO}_3^-$  é o gerenciamento de irrigação auxiliado pelo uso de tensiômetros, de modo a reduzir o volume de água aplicada desnecessariamente (QUEMADA et al., 2013; SOTO et al., 2015).

Estudos comprovam que a modelagem dos fluxos de água no HYDRUS 1D é satisfatória e mostra forte correlação entre valores simulados e medidos (KANZARI et al., 2018; LI et al., 2017; MATTEAU et al., 2019) e que o programa é um método eficaz para prever o fluxo de água e o transporte de nitrogênio (YANG et al., 2017). Por outro lado, neste tipo de modelo existe a necessidade de fornecer um grande número de parâmetros de entrada e, para resultados mais satisfatórios, executar calibração e validação com dados de campo (KANZARI et al., 2018).

#### 4.4.2 Validação e ajuste da simulação computacional por modelagem inversa

Levando em consideração que erros na estimativa do teor de água no solo refletirão diretamente em erros na estimativa da movimentação do contaminante, o modelo preditivo foi ajustado através de modelagem inversa no HYDRUS 1D. Nesta modelagem foi selecionado o ajuste numérico dos parâmetros hidráulicos a partir dos dados de conteúdo volumétrico de água no solo medido em campo (Tabela 17 - Apêndice A).

A Figura 6A e B apresenta a comparação entre os valores medidos e estimados de teor de água no solo nas profundidades de 10 e 50 cm. Pode ser observada uma melhoria no ajuste dos dados medidos e estimados, tendo ocorrido uma aproximação visual gráfica dos pontos. Entretanto, ainda existe uma região de pouca concordância dos dados medidos e estimados no período que abrange os dias 46 a 58. Isso pode estar ocorrendo por ser um período de maior escassez de chuvas. O modelo pode estar apresentando alguma instabilidade ou dificuldade de convergência para chuvas de menor intensidade. Outro fato a ser observado é que esses dias de menor concordância entre dados medidos e estimados são precedidos de um hiato grande em que não há dados medidos disponíveis. A ausência destes dados pode ter prejudicado o ajuste do modelo, visto que a modelagem por ajuste numérico ocorre por etapas sequenciais em cada unidade de tempo/espaço estudados.

Os dados de precipitação efetiva novamente foram plotados em sequência para visualização do regime hídrico do solo (Figura 6C). Os gráficos mostram novamente a mesma coerência entre os dados estimados de teor de água no solo e o regime de chuvas no período estudado. Assim como descrito anteriormente, nos períodos de maior pluviosidade, podem ser observados os maiores valores no teor de água estimados tanto na profundidade de 10 cm como na profundidade de 50 cm.

Para a análise de resíduos e o RMSE dos dados após validação foi considerado o mesmo período que o da modelagem original: dia 46 a dia 92. O cálculo RMSE foi feito para cada profundidade estudada e resultou em um valor de 0,04 tanto para 10 cm como para 50 cm. O RMSE após validação é menor que o RMSE da modelagem original o que indica que foi alcançado um melhor ajuste.

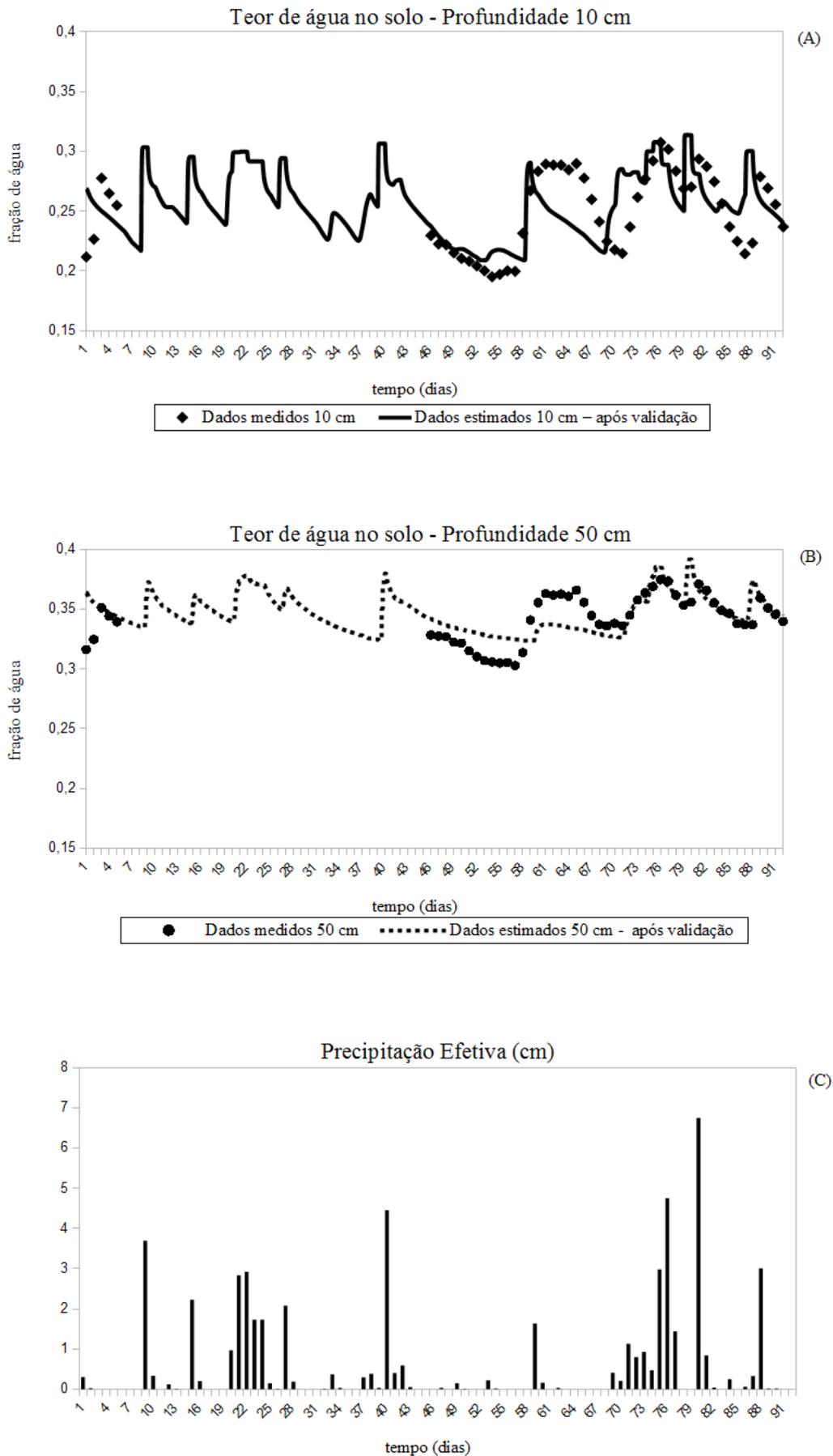


Figura 6. Valores medidos e valores estimados após validação de teor de água no solo nas profundidades de 10 cm (A), de 50 cm (B) e a precipitação efetiva diária calculada (C)

Foi realizada novamente a análise dos resíduos. A Figura 7A e B apresenta os diagramas de distribuição dos resíduos recalculados para as duas profundidades estudadas. Após a validação houve uma melhoria significativa na distribuição dos resíduos, o que indica boa qualidade de ajuste. Os resíduos apresentam normalidade, homoscedasticidade e estão dispersos aleatoriamente em torno de zero, de acordo com o comportamento esperado. A profundidade 50 cm ainda apresenta um ajuste um pouco inferior ao obtido para a profundidade de 10 cm, visto que apresenta resíduos com distribuição um pouco menos homogênea.

Os resíduos padronizados também foram recalculados para as duas profundidades estudadas estão apresentados na Figura 7C e D. Após a validação, os valores estão concentrados entre -2 e 2, e não foi detectada a presença de outliers já que nenhum resíduo se encontra acima de 3 ou abaixo de -3.

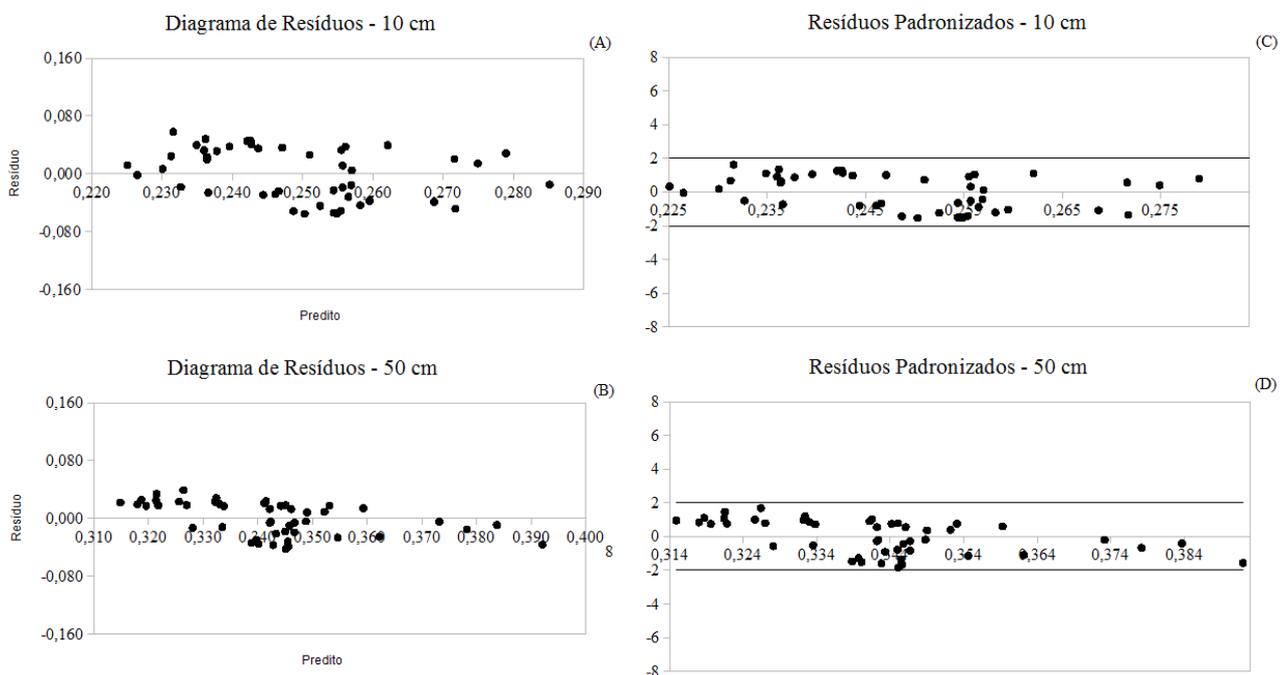


Figura 7. Diagramas de distribuição dos resíduos a (A) 10 cm e (B) 50 cm e diagramas de distribuição de resíduos padronizados a (C) 10 cm e (D) 50 cm, após validação

#### 4.4.2.1 Ajuste numérico dos parâmetros hidráulicos durante o processo de validação

O processo de validação do modelo gera novos valores dos parâmetros hidráulicos do solo. A modelagem fornece o ajuste numérico da  $K_s$  e dos parâmetros da curva de retenção de água. Foram usados como valores iniciais os valores dos parâmetros da curva de retenção obtidos de forma experimental que constam na Tabela 12 e os valores de  $K_s$  de 360 e 240 cm/dia para o horizonte A e B respectivamente. A Tabela 13 apresenta os valores de  $K_s$  e a Tabela 14 apresenta os parâmetros da curva de retenção, ambos ajustados numericamente. O valor de umidade de saturação foi mantido fixo como a média do valor obtido experimentalmente já relatado.

Ks (cm/dia)		
Horizonte A	0 - 24 cm	6297
Horizonte B	24 - 110 cm	2312

Tabela 13. Valores de  $K_s$  ajustados numericamente

Horizonte	Parâmetros							
	$\theta_s$	$\theta_r$	$\alpha$	n	m	w2	$\alpha_2$	n2
Horizonte A	0,41	0,00	0,00	4,19	0,76	0,60	1,69	1,34
Horizonte B	0,49	0,08	0,00	4,01	0,75	0,49	0,08	1,59

Tabela 14. Valores dos parâmetros da curva de retenção de água ajustados numericamente

Foi observado um aumento nos valores de  $K_s$ , indicando uma discordância com as medidas experimentais com o permeâmetro de Guelph. Os valores de  $K_s$  estimados são irreais, estudos posteriores devem focar na análise da sensibilidade do modelo a variação do  $K_s$ .

Os parâmetros da curva de retenção aparentemente sofreram ajustes numéricos de pequena magnitude em relação aos valores obtidos experimentalmente, exceto com relação ao valor de n e para o valor de  $\alpha_2$  para o horizonte B. O valor destes parâmetros antes da validação eram de 1,95 e 0,30 respectivamente. Como esses parâmetros são adimensionais e empíricos, não diretamente correlacionados às propriedades físicas do solo, este aumento foi necessário apenas para melhoria no ajuste da curva e do modelo hidráulico preditivo (GRIGOLON, 2013). Entretanto a análise do RMSE e a distribuição dos resíduos mostrou um ganho significativo na qualidade do ajuste do modelo preditivo da umidade do solo no período estudado.

#### 4.5 Estimativa da concentração de $\text{NO}_3^-$ na solução do solo

A Figura 8 apresenta o gráfico de concentração estimada de  $\text{NO}_3^-$  em função da profundidade do solo em três tempos selecionados: no dia 30, no dia 60 e no dia 92 (último dia simulado). Este gráfico nos fornece informações da movimentação da pluma de  $\text{NO}_3^-$  durante 3 meses após a aplicação do fertilizante.

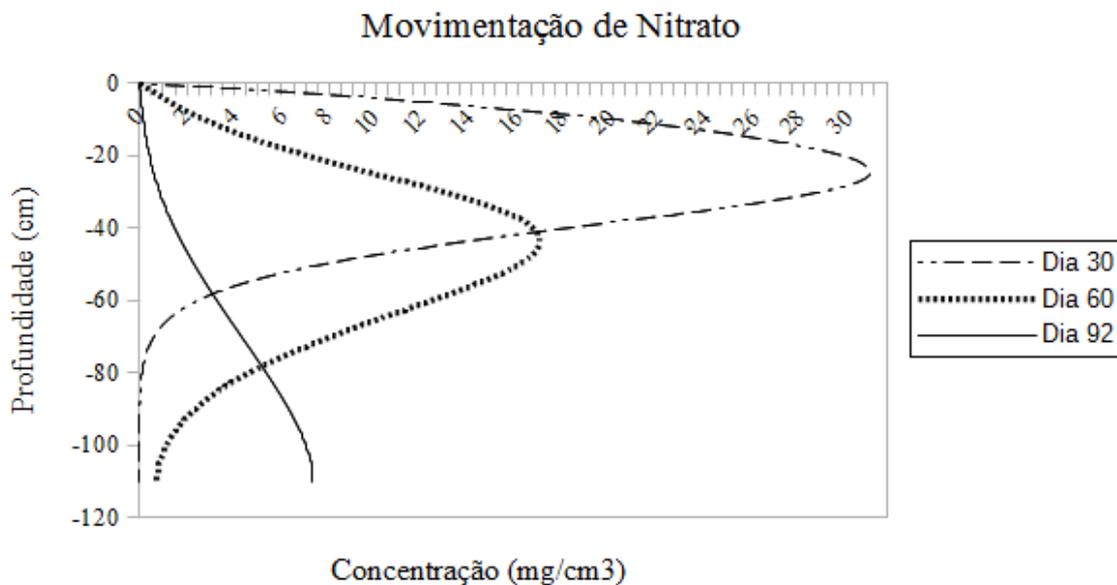


Figura 8: Concentração estimada de nitrato em função da profundidade do solo

O dia 30 mostra a estimativa do perfil de distribuição  $\text{NO}_3^-$  em função da profundidade logo em seguida da aplicação do fertilizante em superfície, que ocorreu no dia 23. Pode-se observar que é estimada uma maior concentração de  $\text{NO}_3^-$  (cerca de  $31 \text{ mg/cm}^3$ ) na região próxima da superfície, a uma profundidade de até 25 cm. O perfil de distribuição estimado para o dia 60 demonstra que houve uma movimentação significativa de  $\text{NO}_3^-$ , sendo o pico de maior concentração deslocado para a profundidade média de 50 cm. No final da simulação pode-se observar que o  $\text{NO}_3^-$  já se deslocou para profundidades superiores a 110 cm, apresentando uma concentração de  $7,3 \text{ mg/cm}^3$  nesta profundidade.

A lixiviação de  $\text{NO}_3^-$  em geral é investigada através da concentração na água de drenagem e da transferência cumulativa deste íon abaixo da zona de influência das raízes (SHAHROKHANIA; SEPASKHAH, 2018). Logo, considerou-se que todo  $\text{NO}_3^-$  que ultrapassasse a profundidade de 110 cm teria sido lixiviado, pois não estaria mais disponível à absorção da raiz.

A Figura 9 mostra os dados estimados pelo HYDRUS 1D de fluxo cumulativo de  $\text{NO}_3^-$  no fundo do perfil. Esta análise do fluxo de massa total que sai do elemento de controle no tempo de simulação é importante porque no gráfico de distribuição de  $\text{NO}_3^-$  (Figura 8) a concentração apresentou uma queda expressiva nos dias 60 e 92 e não atinge o mesmo valor máximo observado no dia 30, sendo necessário identificar se este  $\text{NO}_3^-$  foi perdido por lixiviação, incorporado pela planta ou está adsorvido no solo.

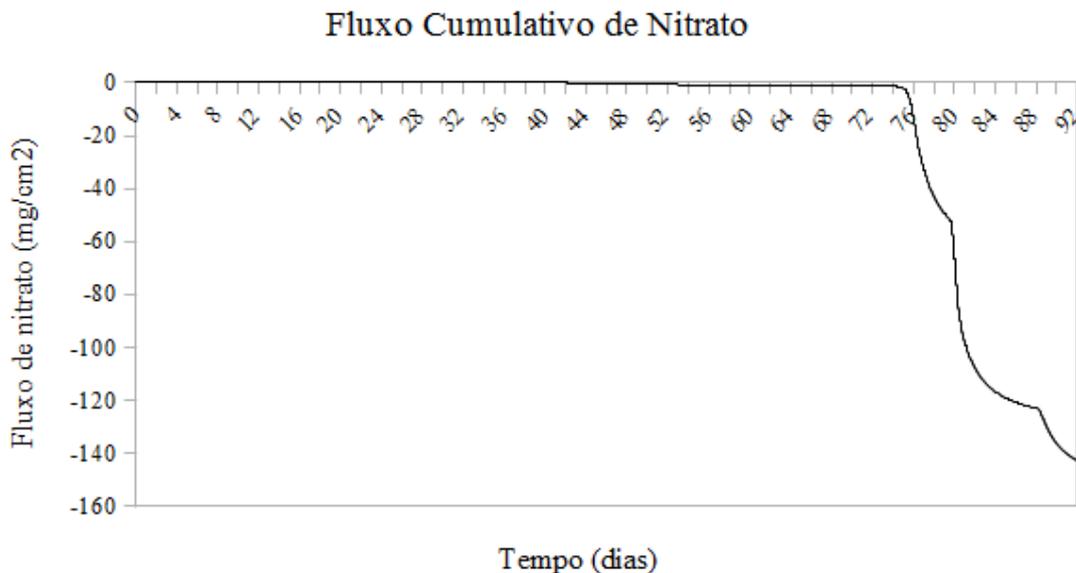


Figura 9: Fluxo cumulativo de nitrato no fundo do perfil (110 cm de profundidade)

O gráfico de fluxo acumulado (Figura 9) mostra que o aumento na intensidade de lixiviação de  $\text{NO}_3^-$  coincide com a época de maior pluviosidade (a partir do dia 76), corroborando com o que já foi dito sobre a importância da compreensão do fluxo da água no solo no estudo de processos de lixiviação. O fluxo total de  $\text{NO}_3^-$  lixiviado em 92 dias, isto é, o total que ultrapassa a profundidade de 110 cm no solo em movimento descendente, foi estimado em  $142,7 \text{ mg/cm}^2$  (fluxo final). A simulação apresentou como valor estimado para o fluxo acumulado de  $\text{NO}_3^-$  de fundo após a aplicação do pulso de fertilizante de  $551,64 \text{ mg/cm}^2$  (pico de fluxo acumulado de nitrato na superfície logo após a aplicação do fertilizante). Comparando os fluxos acumulados de  $\text{NO}_3^-$  inicial e final estimados pelo modelo é possível concluir que houve 26% de lixiviação. Os dados de lixiviação do presente estudo são semelhantes aos dados encontrados na literatura Tabela 15.

Classe textural do solo	Cultura	Local	Clima	Fertilizante N [kgN/ha]	Lixiviação [%]	Referência
argila	café	Piracicaba, São Paulo	tropical de altitude	280 - 350	1,6 - 2,3	Fenilli (2006)
franco argilosa	canola	Fars, Iran	semi- arido	300	3,67	Tafteh; Sepaskhah (2012)
	milho	Fars, Iran	semi- arido	300	18,33	
franco argilosa	arroz	Hubei, China	subtropical de monção	135 - 180	6,9 - 12,5	Tan et al. (2014)
franco argilosa	arroz	Delhi, India	tropical semi-árido	120	23,7	Dash et al. (2015)
franco siltosa	arroz	China oriental	subtropical de monção	220	2,7 - 6,8	Li et al. (2015)
franca	milho	Nova Delhi, Índia	subtropical semiárido	120	18,1	Dash et al. (2016)
	trigo	Nova Delhi, Índia	subtropical semiárido	120	14,3	
franco argilo siltosa	arroz	Shanghai, China	monções	90	10,28	Yang et al. (2017)
franco argilosa	milho	Sari, Iran	semi- arido	400	35,3	Karandish; Šimunek (2017)
franco argilosa	milho	Guangzhou, China	subtropical / tropical	150	36	Zhang et al. (2017)
franco argilosa	-	Iran	semi- arido	92	37	Shahrokhnia; Sepaskhah (2018)

Tabela 15. Dados de lixiviação encontrados na literatura

Estudos indicam que o  $\text{NO}_3^-$  proveniente de fertilizantes sintéticos é a fonte mais importante de contaminação das águas por este íon. Negligenciando os fluxos laterais e outros processos de transformação que este íon pode sofrer, o total estimado de  $\text{NO}_3^-$  lixiviado irá se acumular no lençol freático. A presença de compostos de nitrogênio em aquíferos é um indicativo de contaminação. Apesar de o nitrato ser um dos íons mais encontrados em águas naturais, geralmente ocorrendo em baixos teores nas águas superficiais e podendo atingir altos teores em águas profundas, seu consumo está associado a efeitos adversos à saúde, como a indução à metemoglobinemia (principalmente em crianças) e a formação potencial de compostos orgânicos carcinogênicos (ALABURDA; NISHIHARA, 1998). Segundo uma Portaria Federal, o nitrato tem teor máximo permissível de  $10 \text{ mgN-NO}_3\text{L}^{-1}$  (BRASIL. Portaria nº 36, de 19 de janeiro de 1990) e os estados em geral adotam o mesmo limite em águas de abastecimento.

Outros estudos mostram que as concentrações estimadas de  $\text{NO}_3^-$  no HYDRUS 1D apresentam bom ajuste com os resultados experimentais (TURKELTAUB et al., 2018). Lyu et al (2019) conduziram um estudo de longo prazo que visava estudar o transporte e a distribuição de  $\text{NO}_3^-$  em águas subterrâneas a partir de irrigação com água de reuso e demonstraram que o modelo foi bem-sucedido em prever a concentração média anual de  $\text{NO}_3^-$  no lençol freático. Simulações feitas no HYDRUS 1D coincidem com os resultados obtidos em campo e reforçam a importância da quantificação de  $\text{NO}_3^-$  lixiviado, que está intimamente relacionada com a quantidade de nitrogênio aplicado por meio de fertilizantes, as condições de cultivo e as condições atmosféricas (eventos de precipitação e evapotranspiração) (MATTEAU et al., 2019).

Existe a possibilidade de uma superestimação no valor de  $\text{NO}_3^-$  lixiviado obtido neste estudo, como no estudo realizado por Shahrokhnia et al (2018) que encontrou bom ajuste dos dados estimados no HYDRUS 1D para a concentração de  $\text{NO}_3^-$  abaixo da zona de influência das raízes, com uma pequena superestimação provavelmente associada à simplificação ao se considerar o fluxo unidimensional. Além disso, pode-se citar que a parametrização do modelo neste estudo não considerou a função que descreve a captação de nutrientes pelas raízes do café, apenas sendo inseridos no programa os parâmetros da função de captação de água pelas raízes. Fessehazion et al. (2015) mostram que, partindo de um modelo bem ajustado, quando são observadas diferenças entre a concentração de  $\text{NO}_3^-$  medida e a estimada, isto pode ser explicado pela complexidade envolvida nos processos de transformação de N, pela variabilidade espacial do solo, pelos caminhos preferenciais da água através do perfil do solo e pela aplicação e absorção não uniformes de N.

Os principais fatores que afetam a lixiviação de nitrogênio estão relacionados às características climáticas sazonais e às características do solo. A quantidade de N suscetível à lixiviação também vai variar com a quantidade de fertilizante nitrogenado aplicado, taxas de

mineralização, cultivo, taxa de absorção, práticas de manejo do solo e volume de água percolada a ao longo do perfil do solo (HONG et al., 2014; REICHARDT; LIBARDI; URQUIAGA, 1982). Em alguns casos inclusive se atinge a melhor produtividade da cultura e menor perda por lixiviação praticando uma adubação nitrogenada consideravelmente menor do que a prática comercial comum (SOTO et al., 2015). JIAO et al (2017) mostram que a concentração de  $\text{NO}_3^-$  nas águas subterrâneas e na zona não saturada do solo aumentam gradualmente com o tempo após a aplicação de fertilizantes em excesso. Além disso, dados de análise de N da solução do solo indicaram que quando foi praticada taxa de fertilização convencional (377 kgN/ha) a perda por lixiviação foi 38,7% maior comparando com uma aplicação de fertilização otimizada (300 kgN/ha) (ZHANG et al., 2017). Estes dados apresentados na literatura sugerem que a taxa de lixiviação de N poderia ser controlada pela redução da quantidade basal de fertilizante aplicada.

Seria necessário fazer um estudo mais pormenorizado da bacia hidrográfica da região para fazer estimativas mais precisas da concentração de nitrato nas águas subterrâneas. Estudos mostram que a lixiviação de N aumenta com o fornecimento de N (ARMOUR et al., 2014; BLICHER-MATHIESEN; ANDERSEN; LARSEN, 2014; CAHN; BOULDIN; CRAVO, 1992). Jia et al. (2014) em um estudo que aplicou diferentes níveis de irrigação e fertilização nitrogenada, mostram que a concentração de nitrato na solução do solo coletada em várias camadas do solo aumentou à medida que a taxa de aplicação de fertilizantes de N foi elevada, independentemente do nível de irrigação. Portanto, executar outras modelagens variando a taxa de fertilizante aplicada seria importante. Para esclarecer a influência da precipitação na lixiviação de  $\text{NO}_3^-$  nesta região, outras rotinas de simulação poderiam ser executadas com períodos mais longo em que seria possível observar melhor o regime de precipitação. Para dar continuidade a este estudo é necessário também uma validação desses dados de concentração de  $\text{NO}_3^-$  com medições de campo.

## CONCLUSÃO

- O modelo que melhor descreveu a retenção de água no Latossolo Vermelho Amarelo estudado foi o modelo bimodal de Durner;
- O software HYDRUS 1D foi eficiente para simulações da dinâmica do conteúdo volumétrico da água no Latossolo Vermelho Amarelo, apresentando bom ajuste quando utilizado o modelo de simulação inverso para parametrização
- Utilizando o modelo de equilíbrio para o transporte de solutos no solo através do software HYDRUS 1D foi possível estimar o deslocamento de  $\text{NO}_3^-$  em Latossolo Vermelho Amarelo, estes dados precisam ser validados com avaliações da concentração obtidas no campo;
- O Latossolo Vermelho Amarelo parece ter baixa capacidade de adsorção de  $\text{NO}_3^-$ , com conseqüente risco de lixiviação deste soluto para camadas mais profundas do solo e risco de contaminação de águas subterrâneas;
- Altas taxas de precipitação propiciaram a lixiviação de  $\text{NO}_3^-$ ;
- Houve uma estimativa de 26% de lixiviação, estimado pelo valor de fluxo acumulado de  $\text{NO}_3^-$ ;
- O potencial de lixiviação apresentado indica que a aplicação de fertilizantes nitrogenados implica em riscos ambientais devido à possibilidade de contaminação do lençol freático e em riscos de perdas financeiras.

## REFERÊNCIAS

- ALABURDA, J.; NISHIHARA, L. Presença de compostos de nitrogênio em águas de poços. **Revista de Saúde Pública**, v. 32, n. 2, p. 160–165, abr. 1998.
- ALCANTARA, M. A. K. DE; CAMARGO, O. A. DE. Adsorção de nitrato em solos com cargas variáveis. **Pesquisa Agropecuaria Brasileira**, v. 40, n. 4, p. 369–376, 2005.
- ALLEN, R. G. et al. Crop evapotranspiration-Guidelines for computing crop water requirements-FAO Irrigation and drainage paper 56. **FAO, Rome**, v. 300, n. 9, p. D05109, fev. 1998.
- ALVES, E. D. L.; VECCHIA, F. A. S. Análise de diferentes métodos de interpolação para a precipitação pluvial no Estado de Goiás. **Acta Scientiarum. Human and Social Sciences**, v. 33, n. 2, p. 193–197, 2011.
- ANDA. **SETOR DE FERTILIZANTES ANUÁRIO ESTATÍSTICO 2016**. [s.l: s.n.].
- ARMOUR, J. D. et al. Nitrogen leaching from the root zone of sugarcane and bananas in the humid tropics of Australia. **Agriculture, Ecosystems and Environment**, v. 180, p. 68–78, 1 nov. 2014.
- BARRETO, C. V. G. et al. Distribuição espacial do sistema radicular do cafeeiro fertirrigado por gotejamento em campinas. **Bragantia**, v. 65, n. 4, p. 641–647, 2006.
- BLACK, A.; WARING, S. Nitrate leaching and adsorption in a krasnozem from Redland Bay, QLD. III. Effect of nitrate concentration on adsorption and movement in soil columns. **Soil Research**, v. 14, n. 2, p. 189, 1976.
- BLICHER-MATHIESEN, G.; ANDERSEN, H. E.; LARSEN, S. E. Reprint of “Nitrogen field balances and suction cup-measured N leaching in Danish catchments”. **Agriculture, Ecosystems and Environment**, v. 198, p. 36–43, 15 dez. 2014.
- BOSCH, D. D.; WEST, L. T. Hydraulic Conductivity Variability for Two Sandy Soils. **Soil Science Society of America Journal**, v. 62, n. 1, p. 90, 1998.
- BOTTOMLEY, P. S. et al. Nitrogen Mineralization, Immobilization, and Nitrification. In: [s.l: s.n.].
- BRAGA, B. et al. **Introdução à Engenharia Ambiental**. [s.l: s.n.].
- BRUNETTO, G. et al. Destino do nitrogênio em videiras “chardonnay” e “riesling renano” quando aplicado no inchamento das gemas. **Rev. Bras. Frutic**, n. 3, p. 497–500, 2006.
- CAHN, M. D.; BOULDIN, D. R.; CRAVO, M. S. Nitrate sorption in the profile of an acid soil. **Plant and Soil**, v. 143, n. 2, p. 179–183, 1992.
- CAMERON, K. C.; DI, H. J.; MOIR, J. L. Nitrogen losses from the soil/plant system: A review. **Annals of Applied Biology**, v. 162, n. 2, p. 145–173, 2013.
- CARDUCCI, C. E. et al. Modelagem da curva de retenção de água de latossolos utilizando a equação duplo van genuchten. **Revista Brasileira de Ciencia do Solo**, v. 35, n. 1, p. 77–86, 2011.
- CHIEN, S. H.; PROCHNOW, L. I.; CANTARELLA, H. Chapter 8 Recent Developments of

Fertilizer Production and Use to Improve Nutrient Efficiency and Minimize Environmental Impacts. **Advances in Agronomy**, v. 102, p. 267–322, 1 jan. 2009.

DASH, C. J. et al. Simulation of Nitrate Leaching under Maize–Wheat Cropping System in a Semiarid Irrigated Area of the Indo-Gangetic Plain, India. **Journal of Irrigation and Drainage Engineering**, v. 142, n. 2, p. 04015053, fev. 2016.

DURNER, W. Hydraulic conductivity estimation for soils with heterogeneous pore structure. **Water Resources Research**, v. 30, n. 2, p. 211–223, fev. 1994.

DURNER, W. et al. Determination of Parameters for Bimodal Hydraulic Functions by Inverse Modeling. **Soil Science Society of America Journal**, v. 62, n. 4, p. 874, 1999.

ELZEFTAWY, A.; CARTWRIGHT, K. **Undisturbed Core Method for Determining and Evaluating the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Sediments**. [s.l.: s.n.]. Disponível em: <<http://archive.org/details/undisturbedcorem19835elze>>.

FAO. World fertilizer trends and outlook to 2018. **Food and Agriculture Organization of United Nations**, p. 66, 2015.

FEDDES, R. A.; KOWALIK, P. J.; ZARADNY, H. Simulation of field water use and crop yield. **Simulation monographs**, p. 9–30, 1978.

FENILLI, T. A. B. **Destino do nitrogênio (15N) do fertilizante em uma cultura de café**. Piracicaba: Biblioteca Digital de Teses e Dissertações da Universidade de São Paulo, 20 jun. 2006.

FERNANDES, F.; LIBARDI, P. Percentagem de recuperação de nitrogênio pelo milho, para diferentes doses e parcelamentos do fertilizante nitrogenado. **Revista Brasileira de Milho e Sorgo**, v. 6, n. 3, p. 285–296, 18 maio 2007.

FESSEHAZION, M. K. et al. Evaluating of soil water balance (SWB-Sci) model for water and nitrogen interactions in pasture: Example using annual ryegrass. **Agricultural Water Management**, v. 146, p. 238–248, 2015.

FIXEN, P. E. et al. Capitalizing on Multi-Element Interactions through balanced nutrition - A pathway to improve nitrogen use efficiency in China, India and North America. **Science in China Ser. C Life Sciences**, v. 48, n. 2, p. 780–790, 2005.

FORDE, B. G.; CLARKSON, D. T. Nitrate and Ammonium Nutrition of Plants: Physiological and Molecular Perspectives. **Advances in Botanical Research**, v. 30, n. C, p. 1–90, 1 jan. 1999.

GHIRBERTO, P. J.; LIBARDI, P. L.; TRIVELIN, P. C. O. Nutrient leaching in an Ultisol cultivated with sugarcane. **Agricultural Water Management**, v. 148, p. 141–149, 31 jan. 2015.

GONÇALVES, A. D. M.; LIBARDI, P. L. Análise da determinação da condutividade hidráulica do solo pelo método do perfil instantâneo. **Revista Brasileira de Ciências do Solo**, v. 37, p. 1174–1184, 2013.

GOULDING, K.; JARVIS, S.; WHITMORE, A. Optimizing nutrient management for farm systems. **Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences**, v. 363, n. 1491, p. 667–

680, 2008.

GRIGOLON, G. B. Curva De Retenção De Água No Solo Determinada a Partir De Um Número Mínimo De Pares De Umidade E Tensão Na Câmara De Richards. p. 83, 2013.

HALLAK, R.; PEREIRA FILHO, A. J. Metodologia para análise de desempenho de simulações de sistemas convectivos na região metropolitana de São Paulo com o modelo ARPS: sensibilidade a variações com os esquemas de advecção e assimilação de dados. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v. 26, n. 4, p. 591–608, dez. 2012.

HARTEMINK, A. E. et al. Soil Nitrate and Water Dynamics in Sesbania Fallows, Weed Fallows, and Maize. **Soil Science Society of America Journal**, v. 60, n. 2, p. 568, 1996.

HONG, E. M. et al. Monitoring nutrient accumulation and leaching in plastic greenhouse cultivation. **Agricultural Water Management**, v. 146, p. 11–23, 2014.

HOSSAIN, M.; SINGH, V. P. Fertilizer use in Asian agriculture: implications for sustaining food security and the environment. **Nutrient Cycling in Agroecosystems**, v. 57, p. 155–169, 2000.

JIA, X. et al. Effect of different nitrogen and irrigation treatments on yield and nitrate leaching of summer maize (*Zea mays* L.) under lysimeter conditions. **Agricultural Water Management**, v. 137, p. 92–103, 2014.

JIAO, X. et al. Impact of Groundwater Level on Nitrate Nitrogen Accumulation in the Vadose Zone Beneath a Cotton Field. **Water**, v. 9, 2017.

KANZARI, S. et al. Hydrus-1D model calibration and validation in various field conditions for simulating water flow and salts transport in a semi-arid region of Tunisia. **Sustainable Environment Research**, 23 out. 2018.

KER, J. C. Latossolos do Brasil: uma revisão. **Revista Geonomos**, v. 5, n. 1, 1997.

LI, J. et al. Numerical simulation and experimental study on farmland nitrogen loss to surface runoff in a raindrop driven process. **Journal of Hydrology**, 2017.

LIANG, H. et al. Developing a water and nitrogen management model for greenhouse vegetable production in China: Sensitivity analysis and evaluation. **Ecological Modelling**, v. 367, p. 24–33, 10 jan. 2018.

LYU, S. et al. Integration of HYDRUS-1D and MODFLOW for evaluating the dynamics of salts and nitrogen in groundwater under long-term reclaimed water irrigation. **Irrigation Science**, v. 37, n. 1, p. 35–47, 12 jan. 2019.

MARSCHNER, H. **Mineral Nutrition of Higher Plants**. [s.l.] Academic Press, 1986.

MATTEAU, J.-P. et al. Coupling of a nitrate production model with HYDRUS to predict nitrate leaching. **Agricultural Water Management**, v. 213, p. 616–626, 1 mar. 2019.

MELO FILHO, J. F. DE; SACRAMENTO, J. A. A. S. DO; CONCEIÇÃO, B. P. S. Water-retention curve modelled by the psychrometer method for soil physical quality index determination. **Engenharia Agricola**, v. 35, n. 5, p. 959–966, 2015.

MIQUELETTO, M. **Desenvolvimento de procedimentos numéricos para análise de infiltração e estabilidade de taludes em bacias de drenagem** **Desenvolvimento de procedimentos numéricos para análise de infiltração e estabilidade de taludes em bacias de drenagem**, 2007.

MIRANDA, R. A. C. DE; PEREIRA, F. R.; MONAT, A. S. Interceptação de Chuva em Cafezais Adensados da Região Serrana Centro-Norte Fluminense. **Revista Brasileira de Agrometeorologia**, p. 283–288, 2004.

MUALEM, Y. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. **Water Resources Research**, v. 12, n. 3, p. 513–522, 1 jun. 1976.

NIELSEN, D. R.; BIGGAR, J. W.; ERH, K. T. Spatial variability of field-measured soil-water properties. **Hilgardia**, v. 42, n. 7, p. 215–259, nov. 2014.

OLIVEIRA, A. M. DE. Valoração econômica dos danos ambientais causados pela erosão do solo agrícola: um estudo de caso do município de Santo Antônio do Jardim-SP. 2004.

PAW U, K. T.; GAO, W. Applications of solutions to non-linear energy budget equations. **Agricultural and Forest Meteorology**, v. 43, n. 2, p. 121–145, 1 jul. 1988.

PAZ GONZÁLEZ, A. et al. Variabilidad espacial de la infiltración en una ladera determinada con permeámetro de Guelph en infiltrómetro de tensión. **Temas de Investigación en Zona No Saturada**, v. Pamplona, 2001.

PEDRINI, D. C.; TEN CATEN, C. S. Comparação entre gráficos de controle para resíduos de modelos. **Gestão da Produção, Operações e Sistemas**, v. 4, p. 123–140, 2008.

PEREIRA, A. S. et al. Compilação de coeficientes de cultura (Kc) determinados em condições brasileiras. **CONGRESSO BRASILEIRO DE AGROMETEOROLOGIA**, 2005.

QUEMADA, M. et al. Meta-analysis of strategies to control nitrate leaching in irrigated agricultural systems and their effects on crop yield. **Agriculture, Ecosystems and Environment**, v. 174, p. 1–10, 15 jul. 2013.

RASSAM, D. et al. **The HYDRUS-1D Software Package for Simulating the One-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Media: Tutorial**. versão 1.0 ed. Riverside: CSIRO Land and Water, 2018.

REICHARDT, K.; LIBARDI, P. L.; URQUIAGA, S. C. Fate of fertilizer nitrogen in soil-plant systems with emphasis on the tropics. **INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY (Ed.). Agrochemicals: fate in food and the environment**, n. June, p. 277–290, 1982.

REICHARDT, K.; TIMM, L. Solo, planta e atmosfera: conceitos, processos e aplicações. 2004.

RODRIGUES, L. N.; PRUSKI, F. F.; SILVA, E. M. Metodologia para estimativa da precipitação efetiva em áreas agrícolas. **CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA AGRÍCOLA**, v. 32, 2003.

SANCHEZ, P. A. Properties and Management of Soils in the Tropics. **Soil Science**, v. 124, n. 3, p. 187, 1977.

- SANTOS et al. **Sistema Brasileiro de Classificação de Solos**. [s.l.: s.n.].
- SATYANAGA, A. et al. Water characteristic curve of soil with bimodal grain-size distribution. **Computers and Geotechnics**, v. 48, p. 51–61, mar. 2013.
- SCHAAP, M. G.; LEIJ, F. J.; VAN GENUCHTEN, M. T. rosetta: a computer program for estimating soil hydraulic parameters with hierarchical pedotransfer functions. **Journal of Hydrology**, v. 251, n. 3–4, p. 163–176, 1 out. 2001.
- SCHMAL, M. **Cinética e reatores: Aplicação à engenharia química**. 3 Edição ed. Rio de Janeiro: Sinergia, 2017.
- SCHROTH, G. et al. Subsoil accumulation of mineral nitrogen under polyculture and monoculture plantations, fallow and primary forest in a ferralitic Amazonian upland soil. **Agriculture, Ecosystems and Environment**, v. 75, n. 1–2, p. 109–120, 1999.
- SCOTT, H. *Soil physics: Agricultural and environmental applications*. 2000.
- SHAHROKHANIA, M. H.; SEPASKHAH, A. R. Water and nitrate dynamics in safflower field lysimeters under different irrigation strategies, planting methods, and nitrogen fertilization and application of HYDRUS-1D model. **Environmental Science and Pollution Research**, v. 25, n. 9, p. 8563–8580, 8 mar. 2018.
- SILVA, A. C. DA et al. Evapotranspiração e coeficiente de cultura do cafeeiro irrigado por pivô central. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 15, n. 12, p. 1215–1221, dez. 2011.
- ŠIMŮNEK, J., ŠEJNA, M., SAITO, H., SAKAI, M., & VAN GENUCHTEN, M. T. **The HYDRUS-1D software package for simulating the movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated media, version 4.0: HYDRUS Software Series 3**. Riverside: Department of Environmental Sciences, University of California Riverside, California, USA, v. 315, 2008.
- ŠIMŮNEK, J.; VAN GENUCHTEN, M. T.; ŠEJNA, M. Recent Developments and Applications of the HYDRUS Computer Software Packages. **Vadose Zone Journal**, v. 15, n. 7, p. 0, 25 maio 2016.
- SOTO, F. et al. Consideration of total available N supply reduces N fertilizer requirement and potential for nitrate leaching loss in tomato production. **Agriculture, Ecosystems and Environment**, v. 200, p. 62–70, 1 fev. 2015.
- SOUZA PINTO, C. **Curso básico de mecânica dos solos**. São Paulo: Oficina de Textos, 2000.
- TAFTEH, A.; SEPASKHAH, A. R. Application of HYDRUS-1D model for simulating water and nitrate leaching from continuous and alternate furrow irrigated rapeseed and maize fields. **Agricultural Water Management**, v. 113, p. 19–29, 1 out. 2012.
- TEIXEIRA, G. W. Land use effects on soil physical and hydraulic properties of a clayey Ferralsol in the Central Amazon. **Bayreuther Bodenkundliche Berichte**, v. 72, p. 1–255, 2001.
- TEIXEIRA, P. C. et al. **Manual de métodos de análise se solo**. [s.l.: s.n.].

- TH. VAN GENUCHTEN, M.; LEIJ, F. Solute Transport. In: **Soil Physics Companion**. [s.l.: s.n.]. p. 189–248.
- TURKELTAUB, T. et al. Recharge and Nitrate Transport Through the Deep Vadose Zone of the Loess Plateau: A Regional-Scale Model Investigation. **Water Resources Research**, 2018.
- VAAST, P.; ZASOSKI, R. J.; BLEDSOE, C. S. Effects of solution pH, temperature, nitrate/ammonium ratios, and inhibitors on ammonium and nitrate uptake by Arabica coffee in short-term solution culture. **Journal of Plant Nutrition**, v. 21, n. 7, p. 1551–1564, 21 jul. 1998.
- VAN GENUCHTEN, M. T. A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils1. **Soil Science Society of America Journal**, v. 44, n. 5, p. 892, 1980.
- VAN GENUCHTEN, M. T.; LEIJ, F. J.; YATES, S. R. **The RETC Code for Quantifying the Hydraulic Functions of Unsaturated Soils**. EPA Report 600/2-91/065U.S. Salinity Laboratory, USDA, ARS. [s.l.: s.n.].
- VAN RAIJ, B. et al. Recomendações da adubação e calagem para o Estado de Sao Paulo. p. 1–88, 1997.
- WARRICK, A. **Soil physics companion**. [s.l.: s.n.].
- WETSELAAR, R. Nitrate Distribution in Tropical Soils. **Plant and Soil**, v. 1, n. February, p. 19–31, 1962.
- WILDING, L. P.; DREES, L. R. Spatial Variability and Pedology. In: **Pedogenesis and Soil Taxonomy**. [s.l.] Amsterdam : Elsevier, 1983., 1983. p. 83–116.
- YANG, R. et al. Simulating water and nitrogen loss from an irrigated paddy field under continuously flooded condition with Hydrus-1D model. **Environmental Science and Pollution Research**, v. 24, n. 17, p. 15089–15106, 11 jun. 2017.
- ZHANG, B. et al. Reducing nitrogen leaching in a subtropical vegetable system. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v. 241, p. 133–141, 1 abr. 2017.
- ZHANG, L.; CHEN, Q. Predicting Bimodal Soil–Water Characteristic Curves. **Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering**, v. 131, n. 5, p. 666–670, 2005.
- ZHANG, Z. F.; GROENEVELT, P. H.; PARKIN, G. W. The well-shape factor for the measurement of soil hydraulic properties using the Guelph Permeameter. **Soil and Tillage Research**, v. 49, n. 3, p. 219–221, 1998.

**APÊNDICE A – CONDIÇÕES DE CONTORNO ATMOSFÉRICAS VARIÁVEIS NO TEMPO**

Novembro/2015					
Dia	Dia Sequencial	PT (cm)	PE (cm)	ETo (cm)	Etc (cm)
1	1	0,38	0,30	0,08	0,09
2	2	0,03	0,03	0,15	0,17
3	3	0,00	0,00	0,08	0,09
4	4	0,00	0,00	0,18	0,20
5	5	0,00	0,00	0,19	0,21
6	6	0,00	0,00	0,28	0,31
7	7	0,00	0,00	0,19	0,20
8	8	0,00	0,00	0,20	0,21
9	9	4,56	3,69	0,24	0,27
10	10	0,41	0,34	0,36	0,39
11	11	0,00	0,00	0,37	0,40
12	12	0,15	0,12	0,33	0,36
13	13	0,01	0,01	0,34	0,37
14	14	0,00	0,00	0,33	0,37
15	15	2,75	2,23	0,26	0,29
16	16	0,25	0,20	0,31	0,34
17	17	0,00	0,00	0,30	0,33
18	18	0,00	0,00	0,34	0,37
19	19	0,00	0,00	0,28	0,31
20	20	1,19	0,97	0,21	0,23
21	21	3,50	2,84	0,25	0,27
22	22	3,61	2,92	0,35	0,38
23	23	2,13	1,73	0,12	0,13
24	24	2,14	1,73	0,10	0,11
25	25	0,18	0,15	0,16	0,18
26	26	0,02	0,01	0,31	0,35
27	27	2,57	2,08	0,38	0,41
28	28	0,23	0,19	0,27	0,30
29	29	0,00	0,00	0,17	0,19
30	30	0,00	0,00	0,33	0,36

Dezembro/2015					
Dia	Dia Sequencial	Chuva (cm)	PE (cm)	Eto PM (cm)	Etc (cm)
1	31	0,00	0,00	0,26	0,29
2	32	0,02	0,01	0,30	0,33
3	33	0,46	0,37	0,26	0,29
4	34	0,04	0,03	0,31	0,34
5	35	0,00	0,00	0,29	0,32
6	36	0,00	0,00	0,27	0,30
7	37	0,37	0,30	0,23	0,25
8	38	0,47	0,38	0,39	0,42
9	39	0,04	0,03	0,26	0,29
10	40	5,50	4,46	0,16	0,17
11	41	0,50	0,41	0,35	0,38
12	42	0,73	0,59	0,29	0,32
13	43	0,07	0,05	0,25	0,28
14	44	0,00	0,00	0,31	0,34
15	45	0,00	0,00	0,28	0,30
16	46	0,00	0,00	0,15	0,16
17	47	0,04	0,03	0,23	0,25
18	48	0,00	0,00	0,22	0,24
19	49	0,18	0,15	0,15	0,16
20	50	0,02	0,01	0,16	0,17
21	51	0,00	0,00	0,18	0,20
22	52	0,00	0,00	0,17	0,19
23	53	0,28	0,22	0,20	0,22
24	54	0,03	0,02	0,15	0,17
25	55	0,00	0,00	0,10	0,11
26	56	0,00	0,00	0,15	0,16
27	57	0,00	0,00	0,14	0,15
28	58	0,00	0,00	0,08	0,09
29	59	2,02	1,63	0,06	0,06
30	60	0,20	0,16	0,04	0,04
31	61	0,00	0,00	0,15	0,16

Janeiro/2016					
Dia	Dia Sequencial	Chuva (cm)	PE (cm)	Eto PM (cm)	Etc (cm)
1	62	0,04	0,03	0,15	0,15
2	63	0,00	0,00	0,11	0,11
3	64	0,00	0,00	0,15	0,15
4	65	0,00	0,00	0,14	0,14
5	66	0,00	0,00	0,21	0,21
6	67	0,00	0,00	0,21	0,21
7	68	0,00	0,00	0,23	0,23
8	69	0,51	0,41	0,12	0,12
9	70	0,25	0,21	0,10	0,10
10	71	1,40	1,13	0,15	0,15
11	72	0,99	0,80	0,07	0,07
12	73	1,14	0,93	0,03	0,03
13	74	0,58	0,47	0,06	0,06
14	75	3,68	2,98	0,08	0,08
15	76	5,87	4,75	0,06	0,06
16	77	1,78	1,44	0,13	0,13
17	78	0,00	0,00	0,12	0,12
18	79	0,00	0,00	0,15	0,15
19	80	8,33	6,75	0,13	0,13
20	81	1,04	0,84	0,17	0,17
21	82	0,05	0,04	0,18	0,18
22	83	0,00	0,00	0,23	0,23
23	84	0,30	0,25	0,22	0,22
24	85	0,00	0,00	0,19	0,19
25	86	0,08	0,06	0,23	0,23
26	87	0,41	0,33	0,19	0,19
27	88	3,71	3,00	0,12	0,12
28	89	0,03	0,02	0,14	0,14
29	90	0,03	0,02	0,10	0,10
30	91	0,00	0,00	0,24	0,24
31	92	0,00	0,00	0,27	0,27

Tabela 16: Dados diários de precipitação e evapotranspiração usados como condição de contorno de topo

**APÊNDICE B – DADOS DE CAMPO DE TEOR DE ÁGUA NO SOLO**

Tempo (dia)	Umidade do solo 10 (cm)	Umidade do solo 50 (cm)
46	0,230	0,328
47	0,223	0,327
48	0,222	0,327
49	0,215	0,322
50	0,211	0,322
51	0,208	0,315
52	0,204	0,310
53	0,200	0,307
54	0,195	0,306
55	0,197	0,305
56	0,200	0,305
57	0,200	0,303
58	0,231	0,313
59	0,267	0,341
60	0,283	0,355
61	0,289	0,363
62	0,289	0,362
63	0,289	0,362
64	0,285	0,361
65	0,290	0,366
66	0,278	0,356
67	0,260	0,344
68	0,241	0,337
69	0,225	0,336
70	0,218	0,338
71	0,215	0,336
72	0,237	0,345
73	0,262	0,357
74	0,277	0,363

---

75	0,292	0,369
76	0,307	0,375
77	0,302	0,373
78	0,284	0,362
79	0,269	0,353
80	0,270	0,356
81	0,294	0,371
82	0,287	0,365
83	0,275	0,355
84	0,256	0,349
85	0,237	0,346
86	0,225	0,337
87	0,214	0,337
88	0,223	0,337
89	0,279	0,359
90	0,269	0,351
91	0,256	0,345
92	0,237	0,340

---

Tabela 17. Dados medidos no campo de teor de água no solo

**APÊNDICE C – DADOS EXPERIMENTAIS DE CONCENTRAÇÃO DE NO<sub>3</sub><sup>-</sup> NA SOLUÇÃO DO SOLO**

Data	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> [ppm]
Profundidade 10 cm	
25/11/15	30
27/11/15	105
30/11/15	1616
02/12/15	2730
08/12/15	38
14/12/15	1271
23/12/15	998
18/01/16	45
22/01/16	239
27/01/16	214
Profundidade 50 cm	
25/11/15	2
27/11/15	487
30/11/15	53
02/12/15	32
08/12/15	808
14/12/15	20
23/12/15	19
18/01/16	7
22/01/16	28
27/01/16	81

Tabela 18. Concentração de nitrato na solução do solo